

# 凝聚态物理导论

刘沛松<sup>†</sup>

<sup>†</sup> 抽象物理研究所

2025 年 11 月 20 日

## 目录

1 格林函数: 经典力学案例	2
2 格林函数: Kramers-Kronig 关系	11
3 格林函数: 不含时的量子力学	15
4 格林函数: 传播子	22
5 格林函数: 谱密度	26
A 复数, Cauchy 积分, Laurent 级数和留数定理	33

# 1 格林函数：经典力学案例

我们现在复习一下在之前的数学物理方法课程中学过的格林函数的概念。一切的起点来自于  $\delta$  函数的分布性质：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \delta(t - t_0) dt = f(t_0) \quad (1)$$

对于任意的线性微分算符  $\hat{L}$ ，我们需要满足：

$$\hat{L}[\alpha x_1(t) + \beta x_2(t)] = \alpha \hat{L}x_1(t) + \beta \hat{L}x_2(t) \quad (2)$$

所以对于一个线性微分方程：

$$\hat{L}x(t) = f(t) \quad (3)$$

我们可以构造出一个格林函数  $G(t, t')$ ，使得：

$$\hat{L}x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t') \delta(t - t') dt' \quad (4)$$

利用线性的特点，我们可以构造出一个格林函数满足，**注意啊，这是一个特解，不是通解，通解还要加上齐次解哦：**

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t, t') f(t') dt' \quad (5)$$

代入我们的线性微分方程，我们可以得到：

$$\hat{L} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t, t') f(t') dt' = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t') \delta(t - t') dt' \quad (6)$$

由于  $f(t')$  是任意的，我们可以得到格林函数需要满足的方程：

$$\hat{L}G(t, t') = \delta(t - t') \quad (7)$$

这个方程的意思就是，如果我们对于一个线性系统施加一个  $\delta$  函数的激励，那么系统的响应就是格林函数  $G(t, t')$ 。

用生活化的方法理解也很简单，就是我们考虑一个线性机器，虽然你不知道他的具体工作机制，但是你可以通过给他一个非常短暂的脉冲输入，来观察他的输出，来探测他的工作机制。这个脉冲输入就是  $\delta$  函数，而机器的输出就是格林函数  $G(t, t')$ 。因为机器的工作机制是线性的，所以我们想知道机器对于任意输入的响应，只需要把任意输入拆解成无数个  $\delta$  函数脉冲的叠加，然后把每个脉冲的响应叠加起来就可以了。这就是格林函数方法在时域中的基本理解。格林函数  $G(t, t')$  实际上应该包含两层信息：

- 系统响应的强度，也就是系统对于冲击的响应强度。换句话说，就是你敲打了一下这个机器，他会响多大声。
- 系统响应的时间结构，其实就是相位。也就是说，你敲打了一下这个机器，他会在什么时候开始响，响多长时间，响的频率是多少等等。

这个我们会在接下来学习中仔细探索

对于大多数的系统来说，我们的系统都满足**时间平移不变性**，也就是说系统的性质不会随着时间的变化而变化。比如说，你敲打一个钟，他会响，这个钟的性质不会因为你在早上敲打和晚上敲打而变

化. 再比如说弹簧的刚度系数, 小物块的质量等等, 这些性质都是时间不变的. 所以我们的格林函数实际上只和时间差有关, 也就是说:

$$G(t, t') = G(t - t') \quad (8)$$

于是我们的时域方程变为:

$$\hat{L}G(t - t') = \delta(t - t') \Rightarrow \hat{L}G(\tau) = \delta(\tau) \quad (9)$$

对于时域的脉冲激励函数:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} d\omega \quad (10)$$

这实际上就是强度为 1 的所有频率的平面波的叠加. 所以现在我们可以提出一个新问题: **如何求得系统对于一个强度为 1 的任意频率  $\omega$  做出的响应呢?** 这个物理意思就是, 比如对于一个谐振子系统, 我们想知道当我们用频率为  $\omega$  的外力去一直驱动它的时候, 它会做出什么样的响应 (包含两个层次, 响应的强度和相位).

如果我们考虑到系统的特性, 我们直觉上可以确定, 不同的系统一定对于自己的**固有频率**会有很强的响应, 而对于远离固有频率的驱动频率, 响应会很弱. 这个直觉来源于简单的力学实验: 共振现象发生于系统的驱动频率接近其固有频率的时候. 实际上, 我们会看到, 这个说法既是对的, 也是不完全对的: 对于没有阻尼的系统, 共振峰会出现在固有频率处, 并且峰值会发散; 对于有阻尼的系统, 共振峰会有偏移, 而且峰值是有限的.

接下来, 我们回顾一下经典力学中带有阻尼的谐振子系统, 来回忆一下格林函数的求解过程. 带有阻尼的谐振子系统的运动方程为:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \gamma \frac{dx(t)}{dt} + kx(t) = F(t) \quad (11)$$

其中  $m$  是质量,  $\gamma$  是阻尼系数,  $k$  是弹性系数,  $F(t)$  是外力. 我们首先采用最一般的方法来求解这个方程. 我们先看齐次方程:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \gamma \frac{dx(t)}{dt} + kx(t) = 0 \quad (12)$$

特征方程为:

$$m\lambda^2 + \gamma\lambda + k = 0 \quad (13)$$

解得:

$$\lambda = \frac{-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4mk}}{2m} \quad (14)$$

根据判别式的不同, 我们有三种情况:

- $\gamma^2 > 4mk$ : 过阻尼情况, 两个实根  $\lambda_1, \lambda_2$ .
- $\gamma^2 = 4mk$ : 临界阻尼情况, 一个重根  $\lambda$ .
- $\gamma^2 < 4mk$ : 欠阻尼情况, 一对共轭复根  $\lambda = -\beta \pm i\omega_1$ .

其中:

$$\beta = \frac{\gamma}{2m}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_1 = \sqrt{\omega_0^2 - \beta^2} = \sqrt{\frac{k}{m} - \left(\frac{\gamma}{2m}\right)^2} \quad (15)$$

对于每一种情况，我们都可以写出齐次方程的通解，在这个小节中，我们主要考虑欠阻尼的情况，也就是  $\gamma^2 < 4mk$ 。现在我们可以写出欠阻尼情况下齐次方程的通解为：

$$x_h(t) = e^{-\beta t}(C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t) \quad (16)$$

我们可以发现，系统的响应是一个指数衰减的振荡，衰减速率为  $\beta$ ，振荡频率为  $\omega_1$ 。如果没有外部驱动的话，系统最终会静止在平衡位置：就像是商场里面的大门，被人推开之后，会来回摆动几次，然后最终静止下来。

现在我们继续求特解，我们考虑一个简单情况  $F(t) = F_0 \cos(\omega t)$ ，这个驱动频率  $\omega$  是任意的。我们现在只需要求一个特解，我们猜测特解的形式为：

$$x_p(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \quad (17)$$

代入方程，我们得到：

$$A = \frac{F_0(k - m\omega^2)}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}, \quad B = \frac{F_0\gamma\omega}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \quad (18)$$

所以我们最终的解为：

$$x(t) = e^{-\beta t}(C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t) + \frac{F_0(k - m\omega^2)}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \cos(\omega t) + \frac{F_0\gamma\omega}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \sin(\omega t) \quad (19)$$

我们现在考虑系统在稳态下的行为，也就是齐次解消失之后的行为：

$$x(t) = \frac{F_0(k - m\omega^2)}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \cos(\omega t) + \frac{F_0\gamma\omega}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \sin(\omega t) \quad (20)$$

这可以写为振幅-相位的形式：

$$x(t) = \frac{F_0}{\sqrt{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}} \cos(\omega t - \delta) \quad (21)$$

其中相位延迟  $\delta$  为：

$$\tan \delta = \frac{\gamma\omega}{k - m\omega^2} \Rightarrow \delta = \arctan\left(\frac{\gamma\omega}{k - m\omega^2}\right) \quad (22)$$

这完全是力学中学过的内容，没什么新鲜的。

现在我们考虑使用格林函数方法来求解这个方程，格林函数需要满足：

$$m \frac{d^2}{dt^2} G(t - t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t - t') + k G(t - t') = \delta(t - t') \quad (23)$$

我们先考虑  $t \neq t'$  的区域，也就是齐次方程：

$$m \frac{d^2}{dt^2} G(t - t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t - t') + k G(t - t') = 0 \quad (24)$$

这又分为两个区域： $t < t'$  和  $t > t'$ ，他们的格林函数分别记为  $G^<(t - t')$  和  $G^>(t - t')$ 。对于这个辅助方程，格林函数齐次方程的通解为：

$$G(t, t') = e^{-\beta t}(C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t) \quad (25)$$

对于  $t < t'$  的区域，我们的解为：

$$G^<(t, t') = e^{-\beta t}(A_1 \cos \omega_1 t + A_2 \sin \omega_1 t) \quad (26)$$

对于  $t > t'$  的区域, 我们的解为:

$$G^>(t, t') = e^{-\beta t} (B_1 \cos \omega_1 t + B_2 \sin \omega_1 t) \quad (27)$$

我们现在考虑边界条件, 就是最一般的**因果关系**, 也就是说, 系统不可能在受到激励之前就做出响应. 所以我们有:

$$G^<(t, t') = 0 \quad (t < t') \quad (28)$$

所以  $A_1 = A_2 = 0$ . 接下来我们需要考虑在  $t = t'$  处的连续性条件和跳跃条件. 首先是连续性条件:

$$G^<(t', t') = G^>(t', t') \quad (29)$$

由于  $G^<(t', t') = 0$ , 所以我们有:

$$0 = e^{-\beta t'} (B_1 \cos \omega_1 t' + B_2 \sin \omega_1 t') \quad (30)$$

接下来是跳跃条件, 我们对格林函数方程在  $t = t'$  处积分:

$$\int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} \left[ m \frac{d^2}{dt^2} G(t-t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t-t') + k G(t-t') \right] dt = \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} \delta(t-t') dt \quad (31)$$

取  $\varepsilon \rightarrow 0$ , 我们得到:

$$m \left[ \frac{d}{dt} G(t-t') \right]_{t=t'-0}^{t=t'+0} = 1 \quad (32)$$

也就是说:

$$m \left( \frac{d}{dt} G^>(t', t') - \frac{d}{dt} G^<(t', t') \right) = 1 \quad (33)$$

由于  $G^<(t', t') = 0$ , 所以:

$$m \frac{d}{dt} G^>(t', t') = 1 \quad (34)$$

从而我们可以解出  $B_1$  和  $B_2$ :

$$B_1 = 0, \quad B_2 = \frac{1}{m\omega_1} e^{\beta t'} \quad (35)$$

所以最终我们得到欠阻尼情况下的格林函数为:

$$G(t, t') = \Theta(t-t') \frac{1}{m\omega_1} e^{-\beta(t-t')} \sin(\omega_1(t-t')) \quad (36)$$

其中  $\Theta(t-t')$  是**Heaviside 阶跃函数**, 保证了因果关系. 从而我们任意的一个解可以写为:

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t, t') f(t') dt' = \int_{-\infty}^t \frac{1}{m\omega_1} e^{-\beta(t-t')} \sin(\omega_1(t-t')) f(t') dt' \quad (37)$$

这是我们之前在数学物理方法课程中学过的内容. 他的物理意义是, 系统的响应是过去所有时刻的外力  $f(t')$  经过格林函数加权之后的叠加.

现在我们换一个思路来求解格林函数, 我们考虑 Fourier 变换的方法来求解格林函数. 我们首先明确我们的 Fourier 变换定义为:

$$\tilde{f}(\omega) = \mathcal{F}[f(t)] = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \quad (38)$$

对应的逆变换为:

$$f(t) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(\omega)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (39)$$

我们需要求解的函数是:

$$\hat{L}G(t-t') = \delta(t-t') \quad (40)$$

注意, 我们之前就说了, 因为系统是时间平移不变的, 所以格林函数只和时间差有关:

$$\hat{L}G(\tau) = \delta(\tau) \quad (41)$$

我们对上式两边做 Fourier 变换:

$$\mathcal{F} \left[ \frac{d^2 G(\tau)}{d\tau^2} \right] = -\omega^2 \tilde{G}(\omega), \quad \mathcal{F} \left[ \frac{dG(\tau)}{d\tau} \right] = -i\omega \tilde{G}(\omega), \quad \mathcal{F} [G(\tau)] = \tilde{G}(\omega) \quad (42)$$

所以我们得到:

$$(-m\omega^2 - i\gamma\omega + k)\tilde{G}(\omega) = 1 \quad (43)$$

从而我们得到频域的格林函数为:

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + k} = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega} \quad (44)$$

我们先不着急往下算东西, 我们先来物理理解一下这个频域格林函数.

$$(-m\omega^2 - i\gamma\omega + k)\tilde{G}(\omega) = 1 \quad (45)$$

这个方程的物理意义是, 当我们给系统一个频率为  $\omega$  的驱动力的时候, 如果强度是 1, 那么系统会做出的响应就是  $\tilde{G}(\omega)$ , 他的强度  $|\tilde{G}(\omega)|$ , 反应了系统对于强度为 1 的频率为  $\omega$  的驱动力的响应强度, 而相位  $\arg \tilde{G}(\omega)$  则反应了系统响应的的时间结构, 其实就是延迟. 我们可以计算出响应的强度:

$$|\tilde{G}(\omega)| = \frac{1}{\sqrt{(m(\omega_0^2 - \omega^2))^2 + (\gamma\omega)^2}} \quad (46)$$

我们可以看到, 当  $\omega$  接近  $\omega_0$  的时候, 响应的强度会变得很大, 这就是共振现象. **注意这里的共振峰是有限的, 因为我们有阻尼项  $\gamma$ , 如果没有阻尼项, 那么在  $\omega = \omega_0$  的时候, 响应强度会发散.** 而且, 真正的共振峰位置会因为阻尼项的存在而发生偏移, 具体来说, 共振峰位置在:

$$\omega_{\text{res}} = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{2m^2}} \quad (47)$$

如果我们看相位的话, 我们有:

$$\arg \tilde{G}(\omega) = \arctan \left( \frac{\gamma\omega}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) \quad (48)$$

这就是我们之前用力学方法求解出来的相位延迟  $\delta$ , 这没什么新鲜的. 力学系统之前求出来的相位结果, 不就是假设了是单频驱动吗? 这和我们现在频域格林函数的相位结果是一致的. 如果力学系统是被多个频率的驱动同时驱动的话, 那么每个频率的驱动都会有一个对应的相位延迟, 这个相位延迟就是由频域格林函数的相位决定的. 我们看看这个相位在不同频率下的表现:

1. 当  $\omega \ll \omega_0$  的时候, 也就是驱动频率远低于系统的固有频率, 这个时候  $\arg \tilde{G}(\omega) \approx 0$ , 也就是(稳态之后)说系统的响应和驱动力是同相的, 没有相位延迟. 换句话说, 我们系统的反应频率是可以跟上驱动力的频率的, 所以没有相位延迟.
2. 当  $\omega = \omega_0$  的时候, 也就是驱动频率等于系统的固有频率, 这个时候  $\arg \tilde{G}(\omega) = \frac{\pi}{2}$ , 也就是说(稳态之后)系统的响应相对于驱动力有  $\frac{\pi}{2}$  的相位延迟.

3. 当  $\omega \gg \omega_0$  的时候, 也就是驱动频率远高于系统的固有频率, 这个时候  $\arg \tilde{G}(\omega) \approx \pi$ , 也就是说(稳态之后)系统的响应相对于驱动力有  $\pi$  的相位延迟, 输出和输入是反相的. 这就是机械系统中的惯性效应.

现在我们必须把两个拼图拼在一起, 也就是时域和频域的格林函数之间的关系. 从频域出发, 我们知道, 对于频率为  $\omega$  强度为 1 的波, 系统的响应为  $\tilde{G}(\omega)$ . 如果我们回到时域来看, 我们时域的格林函数就是把不同的频率的响应叠加起来:

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (49)$$

这个数学技巧我们要熟悉:

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega\tau}}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + k} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega\tau}}{-m(\omega^2 + 2i\beta\omega - \omega_0^2)} d\omega \quad (50)$$

把奇点找出来, 实际上之前解特征方程已经解出来了:

$$\omega_+ = -i\beta + \omega_1, \quad \omega_- = -i\beta - \omega_1 \quad (51)$$

这两个奇点都是在复平面的下半平面, 而他们的移位就是来自于这个阻尼项  $\gamma$ , 也就是  $\beta = \frac{\gamma}{2m}$ . 这是一个非常有趣的现象, 我们会在本章结尾处讨论这个现象的物理意义, 但是在这里, 我们提醒大家: 因果关系不是因为阻尼项引入的, 因为即使没有阻尼项, 系统也是因果的. 阻尼项只是把奇点移到了下半平面而已.

现在主要是把围道积分选对. 注意到被积因子中有  $e^{-i\omega\tau}$ , 经过解析延拓后, 他可以写成:

$$e^{-i\omega\tau} = e^{-i(\text{Re}\{\omega\} + i\text{Im}\{\omega\})\tau} = e^{-i\text{Re}\{\omega\}\tau} e^{\text{Im}\{\omega\}\tau} \quad (52)$$

而这个  $\tau = t - t'$ , 所以我们分两种情况讨论:

1. 当  $\tau < 0$  的时候, 也就是  $t < t'$ , 也就是说系统在受到激励之前的响应. 这个时候我们应该把围道闭合在上半平面, 这样积分在无穷远处的贡献会消失(根据 Jordan 引理). 由于两个奇点都在下半平面, 所以围道内没有奇点, 根据 Cauchy 积分定理, 我们得到:

$$G(\tau) = 0 \quad (\tau < 0) \quad (53)$$

这正好符合我们的因果关系: 系统不可能在受到激励之前就做出响应.

2. 当  $\tau > 0$  的时候, 也就是  $t > t'$ , 也就是说系统在受到激励之后的响应. 这个时候我们应该把围道闭合在下半平面, 这样积分在无穷远处的贡献会消失(根据 Jordan 引理). 这就需要留数计算了.

把围道闭合在下半平面, 使用留数定理, 我们考虑  $\omega = \omega_+$  的留数:

$$\text{Res} = \lim_{\omega \rightarrow \omega_+} (\omega - \omega_+) \frac{e^{-i\omega\tau}}{-m(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} = \frac{e^{-i\omega_+\tau}}{-m(\omega_+ - \omega_-)} \quad (54)$$

还得考虑到  $\omega = \omega_-$  的留数(因为大家都在下半平面, 被围道包围):

$$\text{Res} = \lim_{\omega \rightarrow \omega_-} (\omega - \omega_-) \frac{e^{-i\omega\tau}}{-m(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} = \frac{e^{-i\omega_-\tau}}{-m(\omega_- - \omega_+)} \quad (55)$$

所以我们得到:

$$\sum \text{Res} = \frac{i e^{-\beta\tau}}{m\omega_1} \sin \omega_1 \tau \quad (56)$$

这个时候应用留数定理要小心了!

$$\oint_{\gamma} f(\omega) d\omega = -2\pi i \sum \text{Res} \quad (57)$$

这个负号是因为我们现在围道是顺时针方向的: 从负无穷到正无穷, 然后从正无穷的大半圆回到负无穷, 这是顺时针方向. 所以我们得到:

$$G(\tau) = \Theta(\tau) \frac{1}{m\omega_1} e^{-\beta\tau} \sin \omega_1 \tau \quad (58)$$

这就是我们之前求过的时域格林函数! 这样, 我们就确定了时域和频域格林函数之间的关系. 通过频域格林函数, 我们可以很方便地分析系统对于不同频率驱动力的响应特性, 包括共振现象和相位延迟等.

### 总结 1.1: 初识格林函数

格林函数朴素的像我们展示了我们探索世界的几乎唯一方法: 通过给系统一个脉冲激励, 然后观察系统的响应. 然后给系统不同频率的驱动力, 观察系统的响应, 探测系统的本征频率.

1. 我们知道了时域格林函数, 他的意义是, 当系统受到一个强度为  $\delta(t - t')$  的冲击的时候, 系统会做出什么样的响应, 包括响应强度和结构.
2. 所以我们对于一个任意的  $f(t)$ , 我们都可以通过把  $f(t)$  拆解成无数个  $\delta$  函数的叠加, 然后把每个  $\delta$  函数激励下的响应叠加起来, 来求得系统的总响应.
3. 但是我们必须保持因果性: 系统不可能在受到激励之前就做出响应.
4. 我们也可以调查系统对于一个频率为  $\omega$  强度为 1 的正弦波驱动力的响应, 这个响应就是频域格林函数  $\tilde{G}(\omega)$ , 一旦你输入驱动频率  $\omega$ , 他就告诉你系统返回的波的强度和相位.
5. 所以我们立刻对应上了时域和频域格林函数之间的关系: 时间上的脉冲激励可以拆解成无数个频率为  $\omega$  的正弦波驱动力的叠加, 而系统对于每个频率  $\omega$  的响应就是频域格林函数  $\tilde{G}(\omega)$ , 所以时域格林函数就是把所有频率的响应叠加起来.
6. 最后一个小提醒, 我们给出的格林函数的解其实是特解, 我们不关注齐次解是因为很多时候我们关注的是系统在长期稳定状态下的响应, 齐次解通常会随着时间衰减到零, 实际求解的时候要小心.

最后, 作为一个补充, 我们说一下阻尼项  $\gamma$  把奇点移到复平面下半平面的物理意义, 以及为什么即使没有阻尼项, 系统也是因果的. 我们先来看没有阻尼项的情况, 也就是  $\gamma = 0$ , 这时候我们的频域格林函数为:

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (59)$$

他的奇点在  $\omega = \pm\omega_0$ , 都在实轴上. 这个时候, 我们在做围道积分的时候, 会遇到奇点在实轴上的情况. 所以在这个时候, 我们需要引入一个小的虚部位移, 也就是所谓的Feynman  $i\epsilon$  处置, 根据因果性, 我们希望采取:

$$\omega \rightarrow \omega + i\epsilon \quad (\epsilon > 0) \quad (60)$$

这个对于  $\omega$  的虚部位移, 也依赖于我们选择的时域 Fourier 变换的正负号 convention. 从而我们的频域格林函数变为:

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{1}{m(\omega_0^2 - (\omega + i\epsilon)^2)} \quad (61)$$

这个时候, 奇点就被移到了复平面的下半平面, 从而我们就可以按照之前的方法来求解时域格林函数了. 所以即使没有阻尼项, 系统也是因果的, 只是我们需要通过  $i\epsilon$  处置来保证奇点在下半平面. 等价的说, **在这个宇宙里, 虽然没有阻尼, 但是为了数学上的方便, 我们假设了一个非常小的阻尼项, 这样就保证了因果性.**

而当我们有阻尼项  $\gamma$  的时候, 这个阻尼项自然地把奇点移到了复平面的下半平面, 所以我们不需要再额外引入  $i\epsilon$  处置了. 我们千万不能小看这个阻尼, 阻尼的作用是破坏了时间反演对称性: 在深刻的物理图像中, 他沟通了宏观与微观, 量子与经典当我们写下带阻尼的谐振子方程时, 实际上做了一个巨大的近似: 这个阻尼代表了环境对系统的影响, 如果切换到微观的量子力学描述, 我们会发现, 系统和环境是纠缠在一起的, 系统的能量会通过各种复杂的相互作用传递给环境, 这就是阻尼的本质来源, 而这个阻尼项实际上是我们对环境的粗粒化近似的结果. 如果我们真的写出系统和环境的完整哈密顿量, 那么整个系统是没有阻尼的, 但是当我们只关注系统本身的时候, 我们会看到阻尼现象的出现, 这就是开放量子系统的基本思想 - 信息的丢失.

所以, 我们的整体逻辑是: 引入因果性  $\Rightarrow$  所有响应必须在激励之后  $\Rightarrow$  定义出推迟格林函数, 时域必带  $\Theta(t - t')$  函数  $\Rightarrow$  频域格林函数的奇点必须在复平面的下半平面. 实际上, 如果我们考虑  $\Theta$  函数的分布表示, 我们可以完全的在数学上说明这个过程.

#### 定理 1.1: H

Heaviside 阶跃函数  $\Theta(t)$  可以表示为:

$$\Theta(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} d\omega \quad (\eta \rightarrow 0^+) \quad (62)$$

我们来验证一下这个问题, 当  $t > 0$  的时候, 我们把围道闭合在下半平面, 这样积分在无穷远处的贡献会消失 (根据 Jordan 引理), 因为  $\omega = -i\eta$  在下半平面, 所以我们得到:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} d\omega = -2\pi i \quad (63)$$

所以我们有:

$$\Theta(t) = 1 \quad (t > 0) \quad (64)$$

当  $t < 0$  的时候, 我们把围道闭合在上半平面, 这样积分在无穷远处的贡献会消失 (根据 Jordan 引理), 由于没有奇点在上半平面, 所以我们得到:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} d\omega = 0 \quad (65)$$

所以我们有:

$$\Theta(t) = 0 \quad (t < 0) \quad (66)$$

这正好验证了  $\Theta$  函数的定义. 然后我们对格林函数进行 Fourier 变换:

$$\tilde{G}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = -\frac{1}{2\pi i} \iint \frac{1}{m\omega_0} \sin(\omega_0\tau) \frac{e^{-i\Omega\tau}}{\Omega + i\eta} d\Omega d\tau \quad (67)$$

使用恒等式:

$$\sin(\omega_0\tau) = \frac{e^{i\omega_0\tau} - e^{-i\omega_0\tau}}{2i} \quad (68)$$

以及:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(\Omega-\omega)\tau} d\tau = 2\pi\delta(\Omega-\omega) \quad (69)$$

我们可以证明:

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - (\omega + i\eta)^2} \quad (70)$$

这就是我们之前得到的结果, 只是这里我们明确地看到了  $i\eta$  处置的来源: 他来自于时域格林函数中的  $\Theta$  函数. 所以, 因果性  $\Rightarrow$  时域格林函数带  $\Theta$  函数  $\Rightarrow$  频域格林函数奇点在下半平面.

## 2 格林函数: Kramers-Kronig 关系

Kramers-Kronig 关系是联系一个线性系统响应函数的实部与虚部的一组积分关系, 这个关系最根本的基石是因果性 (Causality). 就像我们之前讨论的格林函数一样, 因果性要求系统的响应不能在激励之前发生. 满足这个条件的格林函数, 我们称之为 **推迟格林函数 (Retarded Green Function)  $G^R$** , 因为系统的响应总是滞后于激励. 我们考虑他的 Fourier 变换:

$$\tilde{G}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \int_0^{+\infty} G^R(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (71)$$

一般来说, 推迟格林函数在时域上是复值的, 所以频域上的格林函数也是复值的:

$$\tilde{G}^R(\omega) = \text{Re } \tilde{G}^R(\omega) + i \text{Im } \tilde{G}^R(\omega) \quad (72)$$

我们现在要证明实部和虚部之间的关系.

我们现在把  $\omega$  推广到复平面上,  $\omega = \text{Re}\{\omega\} + i \text{Im}\{\omega\}$ :

$$\tilde{G}^R(\omega) = \int_0^{+\infty} G^R(\tau) e^{i(\text{Re}\{\omega\} + i \text{Im}\{\omega\})\tau} d\tau = \int_0^{+\infty} G^R(\tau) e^{i \text{Re}\{\omega\}\tau} e^{-\text{Im}\{\omega\}\tau} d\tau \quad (73)$$

我们的积分区间是从 0 到  $+\infty$ , 所以只要  $\text{Im } \omega > 0$ , 指数项  $e^{-\text{Im } \omega \tau}$  就会让积分收敛. 上一个小节中, 我们已经讨论过了, 对于推迟格林函数, 一定是要把  $\omega$  往复平面的上半平面移动的, **这就等价于把奇点移到下半平面**, 所有我们可以断定, 推迟格林函数的 Fourier 变换  $\tilde{G}^R(\omega)$  在复平面的上半平面是解析的 (Analytic).

利用这个特性, 现在我们构造一个如下的围道积分:

$$I = \oint_{\gamma} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (74)$$

其中  $\gamma$  是如下的围道: 从  $-\infty$  到  $\omega - \epsilon$  沿实轴走, 然后绕过  $\omega$  点, 然后从  $\omega + \epsilon$  沿实轴走到  $+\infty$ , 然后沿着无穷远的大半圆回到  $-\infty$ . 因为  $\tilde{G}^R(\omega')$  在上半平面是解析的, 而我们选择的围道积分又绕过了  $\omega$  点, 所以根据 Cauchy 积分定理, 我们有:

$$\oint_{\gamma} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = 0 \quad (75)$$

我们把围道积分拆成三部分: 实轴上的积分, 绕过  $\omega$  点的积分, 以及无穷远大半圆的积分. 无穷远大半圆的积分根据 Jordan 引理会消失. 所以我们有:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\text{绕过}\omega} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = 0 \quad (76)$$

我们计算绕过  $\omega$  点的积分, 我们参数化小圆弧:

$$\omega' = \omega + \epsilon e^{i\theta}, \quad d\omega' = i \epsilon e^{i\theta} d\theta, \quad \theta : \pi \rightarrow 0 \quad (77)$$

所以我们有:

$$\int_{\text{绕过}\omega} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = \int_{\pi}^0 \frac{\tilde{G}^R(\omega + \epsilon e^{i\theta})}{\epsilon e^{i\theta}} i \epsilon e^{i\theta} d\theta = i \int_{\pi}^0 \tilde{G}^R(\omega + \epsilon e^{i\theta}) d\theta \quad (78)$$

然后我们取  $\epsilon \rightarrow 0$ , 我们得到:

$$\int_{\text{绕过}\omega} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = -i\pi \tilde{G}^R(\omega) \quad (79)$$

现在我们来计算实轴上的积分:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (80)$$

其中  $\mathcal{P}$  表示主值积分 (Principal Value Integral):

### 定义 2.1: 主值积分

主值积分是指在计算含有奇点的积分时, 忽略掉奇点处的无穷大贡献, 具体来说, 对于一个在  $x = a$  处有奇点的函数  $f(x)$ , 他的主值积分定义为:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{a-\epsilon} f(x) dx + \int_{a+\epsilon}^{+\infty} f(x) dx \right) \quad (81)$$

从而我们有:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{\omega-\epsilon} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega+\epsilon}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \right) \quad (82)$$

综上所述, 我们有:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' - i\pi \tilde{G}^R(\omega) = 0 \quad (83)$$

整理一下:

$$\tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (84)$$

我们把上式的实部和虚部分别写出来:

$$\text{Re } \tilde{G}^R(\omega) + i \text{Im } \tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re } \tilde{G}^R(\omega') + i \text{Im } \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (85)$$

从而我们得到 Kramers-Kronig 关系:

### 定理 2.1: Kramers-Kronig 关系

推迟格林函数的实部和虚部之间满足如下的积分关系:

$$\text{Re } \tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (86)$$

$$\text{Im } \tilde{G}^R(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re } \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (87)$$

这个推导表明, 任何一个 Retarded Green Function 的实部和虚部之间都满足 Kramers-Kronig 关系, 不是随便来的, 而是源于因果性这个基本物理原则。

实验上, 这个定理有重要的应用价值, 我们可以仅仅过测量一个物理量, 就能计算出另一个完全不同的物理量. 比如我们测量一个材料的吸收光谱很简单, 就是对着材料打光, 然后测量透射光的强

度就可以了, 这个就是直接对应于频域格林函数的虚部. 但是如果我们想知道材料的折射率, 直接测量就很麻烦, 需要复杂的干涉实验. 但是利用 Kramers-Kronig 关系, 我们可以通过测量吸收光谱 (频域格林函数的虚部), 然后通过积分计算出折射率 (频域格林函数的实部). 这就是因果性的巧妙之处.

### 例子 2.1: 阻尼谐振子

我们回到上一小节讨论的阻尼谐振子, 他的频域格林函数是:

$$\tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{k - m\omega^2 - i\gamma\omega} = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega} = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\beta\omega} \quad (88)$$

我们计算他的实部和虚部:

$$\operatorname{Re} \tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{m^2} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\beta\omega)^2} \quad \operatorname{Im} \tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{m^2} \frac{2\beta\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\beta\omega)^2} \quad (89)$$

我们验证一下 Kramers-Kronig 关系:

$$\operatorname{Re} \tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im} \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (90)$$

我们需要分析一下:

$$\frac{\operatorname{Im} \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} = \frac{1}{m^2} \frac{2\beta\omega'}{(\omega_0^2 - \omega'^2)^2 + (2\beta\omega')^2} \cdot \frac{1}{\omega' - \omega} \quad (91)$$

的奇点结构: 这个函数在  $\omega' = \omega$  处有一个一阶极点, 这个需要被主值积分处理, 就是说我们要选一个绕过  $\omega$  点的小半圆. 除此之外, 这个函数在复平面的四个点处有极点, 要分析他们, 需要求解如下方程:

$$(\omega_0^2 - \omega'^2)^2 + (2\beta\omega')^2 = 0 \Rightarrow (\omega_0^2 - \omega'^2 + 2i\beta\omega')(\omega_0^2 - \omega'^2 - 2i\beta\omega') = 0 \quad (92)$$

解出:

$$\omega' = 2i\beta \pm \sqrt{\omega_0^2 - 4\beta^2}, \quad \omega' = -2i\beta \pm \sqrt{\omega_0^2 - 4\beta^2} \quad (93)$$

我们看到, 这四个极点中有两个在上半平面, 有两个在下半平面. 我们选择一个闭合的围道, 包含实轴和无穷远大半圆, 并且绕过  $\omega$  点的小半圆在上半平面. 根据 Cauchy 积分定理, 我们有:

$$\oint_{\gamma} \frac{\operatorname{Im} \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = 2\pi i \operatorname{Res}[f, \omega'_1] + 2\pi i \operatorname{Res}[f, \omega'_2] \quad (94)$$

其中  $\omega'_1, \omega'_2$  是上半平面的两个极点. 无穷远大半圆的积分根据 Jordan 引理会消失. 绕过  $\omega$  点的小半圆的积分我们已经计算过了, 是  $-i\pi \tilde{G}^R(\omega)$ . 所以我们有:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im} \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' - i\pi \tilde{G}^R(\omega) = 2\pi i (\operatorname{Res}[f, \omega'_1] + \operatorname{Res}[f, \omega'_2]) \quad (95)$$

剩下的就是机械的计算留数了, 最终我们会得到:

$$\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im} \tilde{G}^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = \frac{1}{m^2} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\beta\omega)^2} = \operatorname{Re} \tilde{G}^R(\omega) \quad (96)$$

验证了 Kramers-Kronig 关系.

现在我们要讨论一下为什么我们一直在强调频域格林函数的虚部和阻尼有关，以及实部和色散有关。这个问题的答案在于能量在一个周期内是如何被吸收和释放的。

### 例子 2.2: 阻尼谐振子

对于上一小节的例子，我们考虑外力  $F(t) = F_0 \cos \omega t$  作用下的阻尼谐振子。如果我们计算瞬时功率：

$$P(t) = F(t) \frac{dx(t)}{dt} = F_0 \cos \omega t \cdot \left( -\omega \frac{F_0}{\sqrt{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}} \sin(\omega t - \delta) \right) \quad (97)$$

我们对瞬时功率做时间平均：

$$\langle P \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T P(t) dt = \frac{1}{2} \omega F_0^2 \frac{\gamma\omega}{(k - m\omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} = \frac{1}{2} \omega F_0^2 \text{Im } \tilde{G}(\omega) \quad (98)$$

我们看到，系统在一个周期内吸收的能量正比于频域格林函数的虚部。

我们注意到  $\text{Im } \tilde{G}(\omega)$  永远是非负的，也就是说外力总是给系统做正功，这是因为阻尼项的存在，能量最终会以热的形式耗散掉。也就是说虚部描述了系统在频率  $\omega$  下对于外界能量输入的吸收能力，也就是耗散特性。

### 3 格林函数：不含时的量子力学

我们从量子力学的一些基本观点出发, 可观测量对应于 Hermitian 算符, 无论是无穷维希尔伯特空间还是有限维希尔伯特空间, 本征值都是实数. 而且, 不同本征值对应的本征态是正交归一的, 从而我们可以选取一组完备的本征态作为希尔伯特空间的基底满足:

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \quad (99)$$

对于任意向量  $|\psi\rangle$ , 我们都可以把他展开在这个完备基底上:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad c_n = \langle n|\psi\rangle \quad (100)$$

所以原来的算符  $\hat{A}$  在这个基底下的矩阵元为:

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |n\rangle\langle n| \Rightarrow A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle = a_n \delta_{mn} \quad (101)$$

如果我们选择能量本征态作为完备基底 (就是 Hamiltonian 的本征态), 从而我们有:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \quad (102)$$

考虑到:

$$\phi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle \Rightarrow \int \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn}, \quad \sum_n \phi_n(x) \phi_n^*(x') = \delta(x - x') \quad (103)$$

有了这些基础, 我们先不要着急, 回到矩阵的本征值问题 (甚至是有限维):

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle \quad (104)$$

然后我们考虑一个复数  $z$ , 我们构造一个新的矩阵:

$$z\mathbb{1} - \hat{A} \quad (105)$$

如果  $z\mathbb{1} - \hat{A}$  是可逆的, 那么我们可以定义一个叫做 Resolvent 的矩阵:

$$\hat{R}(z) := (z\mathbb{1} - \hat{A})^{-1} \quad (106)$$

这个  $R$  叫做  $A$  在点  $z$  的 Resolvent. 所以对于所有可能的  $z$ , 要么  $z\mathbb{1} - \hat{A}$  是不可逆的 (就是谱 spectrum 上的点), 要么  $z\mathbb{1} - \hat{A}$  是可逆的 (就是谱之外的点).

我们有:

$$(z\mathbb{1} - \hat{A})\hat{R}(z) = \mathbb{1} \quad (107)$$

在  $\hat{A}$  的本征态基底, 我们有:

$$z\mathbb{1} - \hat{A} = \text{diag}(z - a_1, z - a_2, \dots, z - a_n) \quad (108)$$

这个逆还是好求一点:

$$\hat{R}(z) = \text{diag}\left(\frac{1}{z - a_1}, \frac{1}{z - a_2}, \dots, \frac{1}{z - a_n}\right) \quad (109)$$

翻译成对角矩阵的形式:

$$\hat{R}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{z - a_n} |n\rangle\langle n| \quad (110)$$

所以我们看到, Resolvent 的奇点就是算符  $\hat{A}$  的本征值. 这就是我们为什么说 Resolvent 可以揭示算符的谱的原因. 如果我们考虑的是 Hamiltonian  $\hat{H}$ , 那我们可以同时有束缚态和散射态, 也就是说谱是离散的和连续的混合, 所以我们有:

$$\hat{R}(z) = \sum_n \frac{1}{z - E_n} |n\rangle\langle n| + \int \frac{1}{z - E} |E\rangle\langle E| dE \quad (111)$$

现在我们把 Resolvent 和格林函数联系起来, 首先我们注意到:

$$(z\mathbb{1} - \hat{H})\hat{R}(z) = \mathbb{1} \quad (112)$$

我们在坐标表象下写出来:

$$\langle x|(z\mathbb{1} - \hat{H})\hat{R}(z)|x'\rangle = \langle x|\mathbb{1}|x'\rangle = \delta(x - x') \quad (113)$$

我们把左边展开:

$$\int \langle x|(z\mathbb{1} - \hat{H})|x''\rangle \langle x''|\hat{R}(z)|x'\rangle dx'' = \delta(x - x') \quad (114)$$

计算这个积分, 我们有:

$$\int (z\delta(x - x'') - H(x, x'')) \langle x''|\hat{R}(z)|x'\rangle dx'' = \delta(x - x') \quad (115)$$

如果 Hamiltonian 是局域的, 也就是说:

$$H(x, x'') = \delta(x - x'')\hat{H}_x \quad (116)$$

那么我们有:

$$(z - \hat{H}_x) \langle x|\hat{R}(z)|x'\rangle = \delta(x - x') \quad (117)$$

仔细观察这个方程, 我们发现他和格林函数的定义方程是一样的!

### 定义 3.1: 量子力学中的格林函数

量子力学中的格林函数定义为满足如下方程的函数  $G(x, x'; z)$ :

$$(z - \hat{H}_x)G(x, x'; z) = \delta(x - x') \quad (118)$$

其中格林函数是 Hamiltonian 的 Resolvent 在坐标表象下的矩阵元:

$$G(x, x'; z) = \langle x|(z\mathbb{1} - \hat{H})^{-1}|x'\rangle \quad (119)$$

现在我们不得不面临一个灾难级的翻译了, 在线性代数中, 我们一说到 Kernel (核), 大家第一反应就是想到线性映射的核空间 (Null Space), 也就是所有被映射到零向量的向量构成的子空间. 但实际上, 我们在讨论积分方程和变换的时候, Kernel 指的就是积分核, **算符在某个表象下的核 = 这个算符在这组基底上的矩阵元**. 比如我们考虑:

$$\langle x|\hat{A}|\psi\rangle = \int \langle x|\hat{A}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = \int A(x, x')\psi(x') dx' \quad (120)$$

这里的  $A(x, x') = \langle x | \hat{A} | x' \rangle$  就是算符  $\hat{A}$  在坐标表象下的核 (Kernel). 我们必须小心区分这两个概念. 从这角度上讲, 格林函数就是 Hamiltonian 的 Resolvent 在坐标表象下的核:

$$G(x, x'; z) = \langle x | (z\mathbb{1} - \hat{H})^{-1} | x' \rangle \quad (121)$$

我们也可以把他写成本征态展开的形式:

$$G(x, x'; z) = \sum_n \frac{\phi_n(x) \phi_n^*(x')}{z - E_n} + \int \frac{\phi_E(x) \phi_E^*(x')}{z - E} dE \quad (122)$$

现在我们考虑一个算符方程 (先不说什么能量, Hamiltonian 之类的):

$$(z\mathbb{1} - \hat{H}) |\psi\rangle = |\phi\rangle \quad (123)$$

在位置表象下, 我们有:

$$(z - \hat{H}_x) \psi(x) = \phi(x) \quad (124)$$

考虑到:

$$R(z) = (z\mathbb{1} - \hat{H})^{-1} \quad (125)$$

我们自然可以写出来:

$$|\psi\rangle = R(z) |\phi\rangle \quad (126)$$

取位置表象:

$$\psi(x) = \langle x | R(z) | \phi \rangle = \int \langle x | R(z) | x' \rangle \langle x' | \phi \rangle dx' = \int G(x, x'; z) \phi(x') dx' \quad (127)$$

这就是我们一直在说的格林函数方法: 我们把原来的算符方程转化成一个积分方程, 积分核就是格林函数.

$$\psi(x) = \int G(x, x'; z) \phi(x') dx' \quad (128)$$

现在我们把些数学问题翻译回物理问题. 考虑本征值问题:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (129)$$

从线性代数的角度来看, 本征值的一个等价定义是:

$$(E_n \mathbb{1} - \hat{H}) |n\rangle = 0 \quad (130)$$

也就是说, 当  $z = E_n$  的时候,  $z\mathbb{1} - \hat{H}$  是不可逆的, 也就是说 Resolvent 在  $z = E_n$  有奇点. 就是说  $z\mathbb{1} - \hat{H}$  在  $z = E_n$  的零空间 (Null Space) 非平凡. 所以能量本征值就是 Hamiltonian 的谱, 也是 Hamiltonian 的 Resolvent 的奇点所在, 也就是格林函数的奇点所在. 这就是我们为什么说格林函数揭示了系统的能谱结构的原因. 现在我们至少明确了一个问题: 我们实际上是求的算符  $(z\mathbb{1} - \hat{H})$  的格林函数, 有的时候你看到文献上所谓的 “Hamiltonian 的格林函数”, 其实就是指的这个算符的格林函数, 是省略的称呼.

可是我们为什么要带着这个  $z$  呢? 这个问题的答案在于, 不是所有的 Hamiltonian 都有良好的逆算符, 比如有 0 本征值的 Hamiltonian, 为了避免这个逆算符不存在的问题, 我们引入了一个复数  $z$ , 取值任意, 从而达到一般意义下  $(z\mathbb{1} - \hat{H})$  可逆的目的. 这样的话谱点就被反应在了格林函数的奇点上, 而不是 Hamiltonian 的逆算符不存在上. 另外, 我们可以直接通过调节  $z$  的虚部来控制格林

函数的解析性质. 如果我们选择把  $z$  写成  $E + i\epsilon$ , 其中  $\epsilon$  是一个非常小的正实数, 那么我们就自然的引入了自然因果关系, 这就是之前我们提到的 retarded Green function (推迟格林函数).

$$\tilde{G}^R(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\epsilon} \quad (131)$$

同样的, 如果我们选择把  $z$  写成  $E - i\epsilon$ , 其中  $\epsilon$  是一个非常小的正实数, 那么我们就自然的引入了反因果关系, 这叫做 advanced Green function (前进格林函数), 对应于:

$$\tilde{G}^A(E) = \frac{1}{E - \hat{H} - i\epsilon} \quad (132)$$

现在我们就以上面的记号为基础, 来解释为什么  $+i\epsilon$  对应于推迟格林函数. 实际上我们第一节就计算过这个问题了, 我们这里再重复一遍, 以加深印象. 我们考虑能量域延迟格林函数:

$$\tilde{G}^R(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\epsilon} \quad (133)$$

这个时候还是算符, 我们取一个能级出来, 比如就是能量本征态  $|n\rangle$ :

$$\tilde{G}_n^R(E) = \langle n | \tilde{G}^R(E) | n \rangle = \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \quad (134)$$

我们先看这一个能量本征态怎么办, 然后等下在用谱分解方法把所有能级都考虑进来. 我们对这个能量本征态的格林函数做 Fourier 逆变换:

$$G_n^R(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} e^{-iEt/\hbar} dE \quad (135)$$

我们现在考虑  $t > 0$  的情况, 重点关注:

$$e^{-iEt/\hbar} \quad t > 0 \quad (136)$$

我们首先考虑解析延拓, 然后为了让围道远处的积分消失 (就是  $E \rightarrow +\infty$  的时候), 我们必须要让  $\text{Im } E < 0$ . 也就是说, 我们必须把积分路径闭合在下半平面. 这时候再看极点的位置, 极点在:

$$E = E_n - i\epsilon \quad (137)$$

这个极点的下半平面, 所以我们将积分路径闭合在下半平面的时候 (注意啊, 下半平面, 留数带个负号了), 极点被包围住了. 根据留数定理, 我们有:

$$G_n^R(t) = \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) e^{-i(E_n - i\epsilon)t/\hbar} = -ie^{-iE_nt/\hbar} e^{-\epsilon t/\hbar}, \quad t > 0 \quad (138)$$

此时再取极限:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G_n^R(t) = -ie^{-iE_nt/\hbar}, \quad t > 0 \quad (139)$$

没问题了, 继续看  $t < 0$  的情况, 这时候我们关注:

$$G_n^R(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} e^{-iEt/\hbar} dE \quad (140)$$

我们考虑  $t < 0$  的时候, 指数项变成:

$$e^{-iEt/\hbar} \quad t < 0 \quad (141)$$

为了让围道远处的积分消失, 我们必须要让  $\text{Im } E > 0$ . 也就是说, 我们必须把积分路径闭合在上半平面. 这时候再看极点的位置, 极点在:

$$E = E_n - i\epsilon \quad (142)$$

这个极点的下半平面, 所以我们将积分路径闭合在上半平面的时候, 极点没有被包围住了. 根据留数定理, 我们直接用 Cauchy 积分定理, 我们有:

$$G_n^R(t) = 0, \quad t < 0 \quad (143)$$

综上所述, 我们有:

$$G_n^R(t) = -i\Theta(t)e^{-iE_nt/\hbar} \quad (144)$$

这就是推迟格林函数的形式, 我们看到, 频域格林函数中取  $+i\epsilon$  确实对应于时域格林函数中的  $\Theta(t)$  因果关系.

**重要提示:** 以上的推导我们必须假设 Fourier 变换的定义是:

$$\tilde{G}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t)e^{i\omega t} dt, \quad G(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(\omega)e^{-i\omega t} d\omega \quad (145)$$

如果你定义成相反的符号, 那么  $+i\epsilon$  就对应于预先格林函数了.

现在我们把所有能级都考虑进来, 我们有:

$$\tilde{G}^R(E) = \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} |n\rangle\langle n| \quad (146)$$

整体做 Fourier 逆变换:

$$G^R(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}^R(E)e^{-iEt/\hbar} dE \quad (147)$$

我们对每一个能级都做同样的分析, 最终我们得到:

$$G^R(t) = \frac{1}{2\pi} \sum_n |n\rangle\langle n| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} e^{-iEt/\hbar} dE = -i\Theta(t) \sum_n |n\rangle\langle n| e^{-iE_nt/\hbar} \quad (148)$$

最终我们有:

$$G^R(t) = -i\Theta(t)e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (149)$$

以及:

$$G^R(t - t') = -i\Theta(t - t')e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} \quad (150)$$

### 例子 3.1: 一维自由粒子的格林函数

我们现在考虑一下一维自由粒子的格林函数. 他的 Hamiltonian 为:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (151)$$

对应的格林函数为:

$$(z - H_x)\tilde{G}(x, x'; z) = \delta(x - x') \quad (152)$$

我们代入 Hamiltonian:

$$\left(z + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \tilde{G}(x, x'; z) = \delta(x - x') \quad (153)$$

引入如下记号:

$$k^2 := \frac{2mz}{\hbar^2} \Rightarrow z = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (154)$$

我们有:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 \right) \tilde{G}(x, x'; z) = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(x - x') \quad (155)$$

注意啊, 这个时候我们考虑的不是时间问题了, 是一个空间问题. 这个翻译成自然的条件就是一开始波在  $x'$  处被激发出来, 然后向两边传播出去. 对于  $x > x'$  的区域, 波自然是向右传播的, 对于  $x < x'$  的区域, 波自然是向左传播的. 所以我们猜测格林函数的形式为:

$$\tilde{G}(x, x'; z) = \begin{cases} C_- e^{-ik(x-x')}, & x < x' \\ C_+ e^{ik(x-x')}, & x > x' \end{cases} \quad (156)$$

连续性要求我们有:

$$C_- = C_+ := C \quad (157)$$

然后我们对方程两边在  $x = x'$  处做积分:

$$\left. \frac{dG}{dx} \right|_{x=x'+0} - \left. \frac{dG}{dx} \right|_{x=x'-0} = \frac{2m}{\hbar^2} = 2i k C \quad (158)$$

从而我们得到:

$$C = \frac{m}{i \hbar^2 k} \quad (159)$$

所以我们最终得到一维自由粒子的格林函数为:

$$\tilde{G}(x, x'; z) = \frac{m}{i \hbar^2 k} \begin{cases} e^{-ik(x-x')}, & x < x' \\ e^{ik(x-x')}, & x > x' \end{cases} \quad (160)$$

我们也可以写成:

$$\tilde{G}(x, x'; z) = \frac{m}{i \hbar^2 k} e^{ik|x-x'|} \quad k = \sqrt{\frac{2mz}{\hbar^2}} \quad (161)$$

这个格林函数描述了一个在  $x'$  处被激发出来的波, 然后向两边传播出去. 这个就是一维自由粒子的格林函数, 我们已经投影到了位置表象下:

$$\tilde{G}(x, x'; z) = \langle x | (z\mathbb{1} - \hat{H})^{-1} | x' \rangle = \frac{m}{i \hbar^2 k} e^{ik|x-x'|} \quad k = \sqrt{\frac{2mz}{\hbar^2}} \quad (162)$$

如果我们取  $z = E + i\epsilon$ , 那么我们就得到了能量延迟格林函数:

$$\tilde{G}^R(x, x'; E) = \langle x | (E + i\epsilon - \hat{H})^{-1} | x' \rangle = \frac{m}{i \hbar^2 k} e^{ik|x-x'|} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + i\epsilon)}{\hbar^2}} \quad (163)$$

可能刚开始学习的时候会有一个困惑: 这个能还原到我们之前的那种  $1/\dots$  的形式吗? 我们来看一下, 先写出来:

$$\tilde{G}^R(E) = \frac{1}{E + i\epsilon - \hat{H}} \quad (164)$$

留神了! 这是一个连续谱问题:

$$\tilde{G}^R(E) = \int \frac{|E_1\rangle\langle E_1|}{E + i\epsilon - E'} dE_1 \quad (165)$$

我们取位置表象:

$$\tilde{G}^R(x, x'; E) = \langle x | \tilde{G}^R(E) | x' \rangle = \int \frac{1}{E + i\epsilon - E_1} \phi_{E_1}(x) \phi_{E_1}^*(x') dE_1 \quad (166)$$

这里的  $\phi_{E_1}(x) = \langle x | E_1 \rangle$  是能量本征态:

$$\phi_{E_1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_1 x}, \quad E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad (167)$$

所以我们有:

$$\tilde{G}^R(x, x'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik_1(x-x')}}{E + i\epsilon - \hbar^2 k_1^2 / 2m} dk_1 \quad (168)$$

做这个积分还是应用留数定理:

$$\tilde{G}^R(x, x'; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{ik|x-x'|} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + i\epsilon)}{\hbar^2}} \quad (169)$$

这样就走通了:

$$\tilde{G}^R(x, x'; E) = \langle x | (E + i\epsilon - \hat{H})^{-1} | x' \rangle \quad (170)$$

现在我们看看时域格林函数:

$$G^R(x, t; x', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}^R(x, x'; E) e^{-iE(t-t')/\hbar} dE \quad (171)$$

代入能量延迟格林函数:

$$G^R(x, t; x', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{ik|x-x'|} e^{-iE(t-t')/\hbar} dE \quad (172)$$

做这个积分, 我们使用  $k$  做积分也行, 也可以直接用  $E$  做积分, 用  $k$  做积分的话稍微简单一些:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk \quad (173)$$

这一类 Gauss 积分我们已经很熟悉了, 最终我们得到:

$$G^R(x, t; x', t') = \frac{1}{i} \Theta(t - t') \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')}} \exp \left[ \frac{im|x - x'|^2}{2\hbar(t - t')} \right] \quad (174)$$

单位是  $[\text{长度}]^{-1}$ . 检查一下单位:  $\tilde{G}^R(E)$  的单位是  $[\text{能量}]^{-1}$ , 投影到矩阵元上是  $[\text{能量}]^{-1} \times [\text{长度}]^{-1}$ , 做 Fourier 逆变换的时候乘以  $dE$ , 所以时域格林函数的单位是  $[\text{长度}]^{-1}$ , 和上面的结果是一致的.

## 4 格林函数：传播子

我们现在应该已经很熟悉格林函数的物理意义以及基础的数学性质了。现在我们专注于格林函数在量子力学中的应用。我们现在考虑含时的 Hamiltonian,  $\hat{H}$ , 从而 Schrödinger 方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (175)$$

我们可以形式上写出它的解为

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (176)$$

其中  $|\psi(t_0)\rangle$  是初始时刻  $t_0$  的波函数, 由初始条件给出.  $\hat{U}(t, t_0)$  是时间演化算符, 它将初始时刻的波函数演化到任意时刻  $t$ . 时间演化算符满足以下方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (177)$$

并且满足初始条件  $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ , 其中  $\mathbb{1}$  是单位算符.

我们的量子学习告诉我们, 如果 Hamiltonian  $\hat{H}$  不显含时间, 那么时间演化算符可以写成指数形式:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right) \quad (178)$$

如果 Hamiltonian 显含时间, 但是在不同时刻 Hamiltonian 之间对易, 那么时间演化算符可以写成:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right) \quad (179)$$

如果 Hamiltonian 显含时间, 并且在不同时刻 Hamiltonian 之间 **不对易**, 那么时间演化算符需要用时间序列算符  $\mathcal{T}$  来表示:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right) \quad (180)$$

如果我们展开时间序列算符的指数, 我们有:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) dt_2 dt_1 + \cdots \quad (181)$$

我们现在考虑一类带有源头的 Schrödinger 方程:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) |\psi(t)\rangle = |S(t)\rangle \quad (182)$$

其中  $|S(t)\rangle$  是源项, **我们暂且不谈论它的物理意义**. 现在我们怎么求解这个方程呢? 标准的解法是考虑 **相互作用汇景**, **interaction picture**. 在相互作用汇景中, 我们定义新的波函数  $|\psi_I(t)\rangle$  和源项  $|S_I(t)\rangle$  如下:

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle \quad (183)$$

$$|S_I(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t, t_0) |S(t)\rangle \quad (184)$$

其中  $\hat{U}(t, t_0)$  是无源 Schrödinger 方程的时间演化算符, 就是我们之前讨论的那些解. 在相互作用汇景中, Schrödinger 方程变成:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t, t_0) |S(t)\rangle \quad (185)$$

这个方程的解可以直接写出:

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{U}^\dagger(t', t_0) |S(t')\rangle dt' \quad (186)$$

其中  $|\psi_I(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$  是初始时刻的波函数. 把解变回到薛定谔汇景, 我们有:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{U}(t, t') |S(t')\rangle dt' \quad (187)$$

我们使用了时间演化算符的半群性质  $\hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t', t_0) = \hat{U}(t, t')$ . 上式的物理意义是, 波函数在时刻  $t$  由两部分组成: 第一部分是初始波函数经过时间演化算符演化到时刻  $t$ , 实际上就是 Homogeneous solution; 第二部分是源项在过去各个时刻  $t'$  对波函数的贡献, 这些贡献经过时间演化算符从时刻  $t'$  演化到时刻  $t$ , 实际上就是 Particular solution. 因此, 时间演化算符  $\hat{U}(t, t')$  可以看作是从时刻  $t'$  到时刻  $t$  的传播子, propagator.

#### 定义 4.1: 传播子

传播子  $\hat{U}(t, t')$  是时间演化算符, 它将时刻  $t'$  的波函数演化到时刻  $t$ . 我们常见的还有传播子的空间矩阵元:

$$K(x, t; x', t') = \langle x | \hat{U}(t, t') | x' \rangle \quad (188)$$

其中  $|x\rangle$  是位置本征态.

于是我们可以把态的演化翻译成波函数语言:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; x', t_0) \psi(x', t_0) dx' + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; x', t') S(x', t') dx' dt' \quad (189)$$

好! 我们对于有源的 Schrödinger 方程已经找到了形式解, 我们先把他放在这里.

现在我们回头看看我们的格林函数. 对于含时的 Schrödinger 方程, 我们定义格林函数  $\hat{G}(t, t')$  满足:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{G}(t, t') = \delta(t - t') \mathbb{1} \quad (190)$$

注意这里的格林函数是一个算符, 而不是一个数值函数, 而且我们先不考虑投影到空间基底, 一次做太多事情过于复杂. 我们首先考虑  $t \neq t'$ , 这时右边为零, 因此格林函数满足无源 Schrödinger 方程:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{G}(t, t') = 0 \quad (t \neq t') \quad (191)$$

等一下? 这难道不就是说, 对于  $t \neq t'$ , 格林函数  $\hat{G}(t, t')$  就是时间演化算符  $\hat{U}(t, t')$ ? 所以我们可以猜测, 这个格林函数的一般解为:

$$\hat{G}(t, t') = \hat{C}(t') \hat{U}(t, t') \quad (192)$$

其中  $\hat{C}(t')$  是一个只依赖于  $t'$  的算符, 它的形式需要通过在  $t = t'$  处的奇点来确定. 为了确定  $\hat{C}(t')$ , 我们把上式代入格林函数的定义方程:

$$\int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{G}(t, t') dt = \int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon} \delta(t - t') \mathbb{1} dt \quad (193)$$

其中  $\epsilon$  是一个非常小的正实数. 我们先计算左边:

$$i\hbar \left[ \hat{G}(t' + \epsilon, t') - \hat{G}(t' - \epsilon, t') \right] - \int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon} \hat{H} \hat{G}(t, t') dt \quad (194)$$

当  $\epsilon \rightarrow 0$ , 第二项趋近于零, 因为积分区间变得非常小. 因此, 左边的极限为:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} i\hbar \left[ \hat{G}(t' + \epsilon, t') - \hat{G}(t' - \epsilon, t') \right] \quad (195)$$

右边的积分直接给出 1. 因此, 我们有:

$$\hat{G}(t' + 0^+, t') - \hat{G}(t' - 0^-, t') = -\frac{i}{\hbar} \mathbb{1} \quad (196)$$

目前为止, 我们还没有引入任何边界条件. 为了唯一确定格林函数, 我们还是引入自然的因果关系:

$$\hat{G}(t, t') = 0 \quad t < t' \quad (197)$$

$$\hat{G}(t, t') = \hat{C}_R \hat{U}(t, t') \quad t > t' \quad (198)$$

这样我们的跃变条件变成:

$$\hat{G}^R(t' + 0^+, t') - 0 = \frac{1}{i\hbar} \mathbb{1} \Rightarrow \hat{C}_R = \frac{1}{i\hbar} \quad (199)$$

因此, 我们得到了含时格林函数的最终形式:

$$\hat{G}^R(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \Theta(t - t') \hat{U}(t, t') \quad (200)$$

这个格林函数叫做时域延迟格林函数, time domain retarded Green function. 我们的推导不依赖于 Hamiltonian 是否显含时间, 也没有投影到空间基底, 因此这个结果是非常一般的:

#### 定义 4.2: Time domain retarded Green function, 时域延迟格林函数

对于一般的含时 Hamiltonian  $\hat{H}(t)$ , 以及时间演化算符  $\hat{U}(t, t')$ , 时域延迟格林函数定义为:

$$\hat{G}^R(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \Theta(t - t') \hat{U}(t, t') \quad (201)$$

其中  $\Theta(t - t')$  是 Heaviside 阶跃函数.

同样的, 如果我们逆转因果关系, 我们可以定义时域前进格林函数:

#### 定义 4.3: Time domain advanced Green function, 时域前进格林函数

对于一般的含时 Hamiltonian  $\hat{H}(t)$ , 以及时间演化算符  $\hat{U}(t, t')$ , 时域前进格林函数定义为:

$$\hat{G}^A(t, t') = -\frac{1}{i\hbar} \Theta(t' - t) \hat{U}(t, t') \quad (202)$$

其中  $\Theta(t' - t)$  是 Heaviside 阶跃函数.

我们注意到, time domain retarded Green function 和时间演化算符之间就差一个因果关系和一个常数因子  $1/i\hbar$ .

现在我们尝试把时域格林函数变换到频域. 问题来了! 我们之前讨论的频域格林函数是针对时间平移不变的系统定义的, 但是现在我们面对的是一个含时 Hamiltonian, 系统不再时间平移不变, 那么频域格林函数还存在吗? 它又该如何定义呢? 我们暂且回避这个问题, 转而考虑一个特殊情况: Hamiltonian  $\hat{H}$  不显含时间, 能否非扰动的求出不含时的  $\hat{H}$  的本征值和本征态不要紧的. 在这种情况下, 时间演化算符为:

$$\hat{U}(t, t') = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t') \right) \quad (203)$$

因此, 时域延迟格林函数为:

$$\hat{G}^R(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \Theta(t - t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t')\right) \quad (204)$$

系统时间平移不变, 格林函数仅仅依赖于时间差  $\tau = t - t'$ , 我们可以定义频域格林函数为:

$$\hat{G}^R(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{G}^R(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E\tau\right) d\tau \quad (205)$$

把时域格林函数代入上式, 我们有:

$$\hat{G}^R(E) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (E - \hat{H})\tau\right) d\tau \quad (206)$$

回忆起:

$$\Theta(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-i\Omega\tau)}{\Omega + i\eta} d\Omega \quad (207)$$

从而我们有:

$$\hat{G}^R(E) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \times \frac{1}{i\hbar} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i(E-\hat{H})\tau/\hbar} e^{-i\Omega\tau}}{\Omega + i\eta} d\Omega d\tau \quad (208)$$

继续使用恒等式:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ia\tau} d\tau = 2\pi\delta(a) \quad (209)$$

我们得到:

$$\hat{G}^R(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\epsilon} \quad (210)$$

这里我们使用了  $\eta\hbar = \epsilon$ , 其中  $\epsilon$  是一个非常小的正实数, 单位为能量,  $\eta$  也是一个非常小的正实数, 单位为频率. 但是至于  $\hat{H}$  怎么展开, 怎么实际计算, 我们先不关心.

现在我们来讨论一下, 为什么一旦  $\hat{H}$  显含时间, 我们就很难这样简单的写出频域格林函数了. 首先, 如果  $\hat{H}$  显含时间, 那么系统不再时间平移不变, 格林函数  $\hat{G}(t, t')$  不再仅仅依赖于时间差  $\tau = t - t'$ , 而是依赖于两个独立的时间变量  $t$  和  $t'$ . 而这个特点直接反应在了系统的动力学问题上: **尽管你可以瞬时地对 Hamiltonian 进行对角化, 但是由于 Hamiltonian 随时间变化, 你无法用一个固定的本征态基底来描述系统的演化, 因为系统的本征态本身在随时间变化.** 因此, 你无法简单地通过傅里叶变换把时域格林函数变换到频域. 其次, 即使你强行对两个时间变量分别进行傅里叶变换, 你也会发现, 频域格林函数  $\hat{G}(E, E')$  现在依赖于两个独立的能量变量  $E$  和  $E'$ , 也就是说你还是绕不过去时间依赖性的问题. 因此, 对于含时 Hamiltonian, 频域格林函数的定义和计算变得非常复杂, 通常需要借助数值方法或者近似方法来处理.

那么我们都用什么常用方法可以用呢? 我们概述一下. 如果 Hamiltonian 显含时间, 但是变化的很慢, 满足绝热近似, 那么我们可以考虑 Wigner transformation + gradient expansion 方法. 如果 Hamiltonian 显含时间, 并且有周期性 (其实这个很常见, 比如外场驱动是周期性的), 那么我们可以使用 Floquet 理论来处理. 这是两个软方法, 有没有硬的方法呢, 也有, 就是 Keldysh-NEGF (非平衡格林函数) 方法. 当然了, 还有其实更实用的方法, 就是暴力数值计算, 比如 Trotter 分解 + 时间步进的方法, 含时密度矩阵重正化群 (tDMRG) 方法, 时间相关的变分原理 (TDVP) 方法等等. 这些方法我们以后有机会再详细讨论.

## 5 格林函数：谱密度

我们还是从量子力学出发, 考虑一个体系的 Hamiltonian  $\hat{H}$  及其本征值问题

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (211)$$

我们就先假设这个谱是离散的, 后面再讨论连续谱的情况. 如果随便拿一个态, 比如  $|\psi\rangle$ , 那么它可以展开为本征态的线性组合

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (212)$$

其中  $c_n = \langle n|\psi\rangle$ . 那么这个态的能量期望值就是

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \quad (213)$$

也就是说, 我们测的能量为  $E_n$  的概率就是  $|c_n|^2$ . 一个重要的提示, 我们这里的  $n$  是量子态的编号, 不是能量的编号! 这就引出了谱密度 (spectral density) 的概念.

### 定义 5.1: 谱密度, spectral density

设  $\hat{H}$  的本征值为  $E_n$ , 本征态为  $|n\rangle$ , 则态  $|\psi\rangle$  的谱密度算符为:

$$\hat{\rho}(E) = \delta(E - \hat{H}) = \sum_n \delta(E - E_n) |n\rangle\langle n| \quad (214)$$

态  $|\psi\rangle$  在能量  $E$  处的谱密度定义为: 对于态  $|\psi\rangle$  进行一次能量测量, 测得能量为  $E$  的概率密度为:

$$S_{|\psi\rangle}(E) = \langle\psi|\hat{\rho}(E)|\psi\rangle = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 \delta(E - E_n) \quad (215)$$

便于我们理解的说法, 就是谱密度告诉我们, 对于任意一个态, 它在不同能量处的“分量”有多大. 而这个  $\delta$  函数, 就明确的筛选出来了, 必须是本征值对应的能量才有贡献. 谱密度的归一化条件是

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S_{|\psi\rangle}(E) dE = 1 \quad (216)$$

因为我们总是能测到某个能量值.

我们举个例子, 你手里拿着一个三棱镜, 让阳光通过它, 你会看到七彩的光谱. 这是因为阳光是由很多不同频率的光混合而成的, 三棱镜把不同频率的光分离开来, 你就能看到不同频率的光了. 然后你对着光谱, 拿着一个光度计, 测量每个频率处的光强. 你测得的光强分布, 就类似于谱密度: 它告诉你, 在不同频率处, 光的“分量”有多大. 如果你测得的光强在某个频率处特别大, 那么说明, 这个频率的光在阳光中占有很大的比例.

同样的,

现在我们转头补充一点数学上的内容.

### 定理 5.1: Sokhotski–Plemelj 定理

对于任意实数  $x$ , 有

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (217)$$

其中  $\mathcal{P}$  表示主值积分 (Cauchy principal value), 即

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left( \int_{-\infty}^{-\epsilon} \frac{f(x)}{x} dx + \int_{\epsilon}^{+\infty} \frac{f(x)}{x} dx \right) \quad (218)$$

这个定理的使用一定是要在积分意义下的, 也就是说, 对于任意试函数  $f(x)$ , 有

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\eta} dx = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0) \quad (219)$$

这个定理在处理含有  $\delta$  函数的表达式时非常有用, 我们后面会经常用到它.

现在来说明 (而不是严格证明), 这个定理的来源. 我们一切的起源就是对于如下积分的计算尝试:

$$I = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\eta} dx \quad (220)$$

这里  $f(x)$  是一个在光滑的, 在无穷远处足够快趋于零的试验函数. 我们专注于正号的情况, 负号的情况类似. 我们可以把这个积分拆成两部分:

$$I = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x f(x)}{x^2 + \eta^2} dx - i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta f(x)}{x^2 + \eta^2} dx \right] \quad (221)$$

我们先看第二部分:

$$I_2 = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta f(x)}{x^2 + \eta^2} dx \quad (222)$$

这指示我们想到一类 Lorentzian 函数:

$$L_\eta(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} \quad (223)$$

他满足:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} L_\eta(x) dx = 1 \quad \text{且} \quad \lim_{\eta \rightarrow 0^+} L_\eta(x) = \delta(x) \quad (224)$$

因此, 我们有:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \pi\delta(x) \quad (225)$$

所以虚部的积分就是:

$$I_2 = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta f(x)}{x^2 + \eta^2} dx = \pi \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = \pi f(0) \quad (226)$$

现在我们要看看这个实部的积分:

$$I_1 = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x f(x)}{x^2 + \eta^2} dx \quad (227)$$

我们还是把积分拆成两部分:

$$I_1 = \int_{|x| > \epsilon} \frac{f(x)}{x} dx + \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{x f(x)}{x^2 + \eta^2} dx \quad (228)$$

其中  $\epsilon$  是一个很小的正数, 而且  $\epsilon \gg \eta$ . 对于第一部分, 是我们直接取极限  $\eta \rightarrow 0^+$  得到的, 这个时候  $x$  大于  $\epsilon$ , 所以分母里的  $\eta^2$  可以忽略不计, 而且也不会遇到  $x = 0$  的奇点. 对于第二部分, 我们注意到, 当  $\eta \rightarrow 0^+$  时,  $f(x)$  在  $[-\epsilon, +\epsilon]$  上可以近似看作常数  $f(0)$ , 因为  $f(x)$  是光滑的, 而且:

$$\frac{x}{x^2 + \eta^2} \quad (229)$$

是一个奇函数, 所以第二部分的积分为零. 因此, 我们得到了:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{xf(x)}{x^2 + \eta^2} dx = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x} dx \quad (230)$$

所以最后我们还是有:

$$I = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x + i\eta} dx = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x} dx - i\pi f(0) \quad (231)$$

这就证明了 Sokhotski-Plemelj 定理:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (232)$$

所以我们还可以写出来:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x - i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} + i\pi\delta(x) \quad (233)$$

还可以略略变形:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{(x - y) \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x - y} \mp i\pi\delta(x - y) \quad (234)$$

### 例子 5.1: $\Theta$ 函数的积分表示

我们之前提到过:

$$\Theta(t) = -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} d\omega \quad (235)$$

应用 Sokhotski-Plemelj 定理, 我们有:

$$\frac{1}{\omega + i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} - i\pi\delta(\omega) \quad (236)$$

因此, 我们有:

$$\Theta(t) = -\frac{1}{2\pi i} \left[ \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega} d\omega - i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \delta(\omega) d\omega \right] \quad (237)$$

我们计算第二部分:

$$-\frac{1}{2\pi i} \left( -i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \delta(\omega) d\omega \right) = \frac{1}{2} \quad (238)$$

第一部分是有趣的函数, 我们不多说了:

$$-\frac{1}{2\pi i} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega} d\omega = \frac{1}{2} \text{sgn}(t) \quad (239)$$

其中  $\text{sgn}(t)$  是符号函数, 当  $t > 0$  时为  $+1$ , 当  $t < 0$  时为  $-1$ . 所以最后我们得到了:

$$\Theta(t) = \frac{1}{2} [\text{sgn}(t) + 1] \quad (240)$$

这正是  $\Theta$  函数的定义.

有了这个恒等式, 我们就可以把谱密度和格林函数联系起来. 上一个小节, 我们说了, 对于不含时的 Hamiltonian, 我们可以写出它的频域推迟格林函数为:

$$\tilde{G}^R(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - \hat{H} + i\eta} \quad (241)$$

对他进行谱分解, 考虑本征谱:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (242)$$

那么我们就有:

$$\tilde{G}^R(E) = \sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{|n\rangle\langle n|}{E - E_n + i\eta} \quad (243)$$

应用 Sokhotski-Plemelj 定理, 我们有:

$$\tilde{G}^R(E) = \sum_n \left[ \mathcal{P} \frac{1}{E - E_n} - i\pi\delta(E - E_n) \right] |n\rangle\langle n| \quad (244)$$

这个时候天然出现了谱密度这个东西, 就是虚部:

$$\text{Im } \tilde{G}^R(E) = -\pi \sum_n \delta(E - E_n) |n\rangle\langle n| = -\pi\hat{\rho}(E) \quad (245)$$

如果我们求他的期望值:

$$\text{Im } \langle\psi|\tilde{G}^R(E)|\psi\rangle = -\pi \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 \delta(E - E_n) = -\pi S_{|\psi\rangle}(E) \quad (246)$$

从而我们得到:

$$S_{|\psi\rangle}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } \langle\psi|\tilde{G}^R(E)|\psi\rangle \quad (247)$$

说来说去, 谱密度到底有什么用呢? **注意啊, 我们目前的讨论都是基于不含时的 Hamiltonian 的.** 首先, 他解决的第一个问题很简单, 就是告诉我们, 一个粒子, 一开始处于某个态  $|\psi\rangle$ , 那么过了一段时间, 他保持在这个状态的概率有多大. 有的文献管这个叫做**生存振幅, survival amplitude**:

$$A_\psi(t) = \langle\psi|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \quad (248)$$

考虑谱分解:

$$A_\psi(t) = \sum_{n,m} \langle\psi|n\rangle \langle n|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|m\rangle \langle m|\psi\rangle = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 e^{-iE_n t/\hbar} \quad (249)$$

如果我们在插入一个恒等式:

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(E - \hat{H}) dE \quad (250)$$

我们有:

$$A_\psi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 \delta(E - E_n) e^{-iEt/\hbar} dE \quad (251)$$

注意到谱密度的定义, 我们有:

$$A_\psi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S_{|\psi\rangle}(E) e^{-iEt/\hbar} dE \quad (252)$$

也就是说, 生存振幅就是谱密度的傅里叶变换. 这就很有意思了, 因为谱密度告诉我们, 态  $|\psi\rangle$  在不同能量处的“分量”有多大, 而生存振幅告诉我们, 态  $|\psi\rangle$  随时间的演化情况. 所以, 态  $|\psi\rangle$  在不同能量处的“分量”有多大, 决定了它随时间的演化情况. 这就是谱密度的第一个用途.

### 例子 5.2: 单色波

一个自然而然的推论: 如果态  $|\psi\rangle$  恰好是某个本征态  $|n\rangle$ , 那么他的谱密度就是:

$$S_{|n\rangle}(E) = \delta(E - E_n) \quad (253)$$

那么他的生存振幅就是:

$$A_n(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(E - E_n) e^{-iEt/\hbar} dE = e^{-iE_n t/\hbar} \quad (254)$$

也就是说, 态  $|n\rangle$  会一直保持不变, 只是多了一个相位因子. 这就是量子力学中的单色波 (monochromatic wave).

### 例子 5.3: 两个本征态的叠加

如果态  $|\psi\rangle$  是两个本征态的叠加, 比如:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1\rangle + |n_2\rangle) \quad (255)$$

那么他的谱密度就是:

$$S_{|\psi\rangle}(E) = \frac{1}{2} [\delta(E - E_{n_1}) + \delta(E - E_{n_2})] \quad (256)$$

那么他的生存振幅就是:

$$A_\psi(t) = \frac{1}{2} [e^{-iE_{n_1}t/\hbar} + e^{-iE_{n_2}t/\hbar}] \quad (257)$$

概率为:

$$|A_\psi(t)|^2 = \frac{1}{2} \cos^2 \left( \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{2\hbar} t \right) \quad (258)$$

也就是说, 态  $|\psi\rangle$  会在两个本征态之间振荡.

### 例子 5.4: 有限宽度的谱

如果态  $|\psi\rangle$  的谱密度在某个能量范围内是连续的, 比如:

$$S_{|\psi\rangle}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (259)$$

这是一个 Lorentzian 分布, 宽度为  $\Gamma$ , 中心在  $E_0$ . 那么他的生存振幅就是:

$$A_\psi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} e^{-iEt/\hbar} dE \quad (260)$$

这个积分可以通过留数定理计算, 结果是:

$$A_\psi(t) = e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/(2\hbar)} \quad (261)$$

计算概率为:

$$|A_\psi(t)|^2 = e^{-\Gamma t/\hbar} \quad (262)$$

也就是说, 态  $|\psi\rangle$  会以指数形式衰减, 他会随着时间的推移逐渐转化成其他态. 这个问题我们会再次强调的

总而言之, 谱密度越窄, 态的时间演化就越接近单色波; 谱密度越宽, 态的时间演化就越复杂, 可能会出现衰减等现象.

接下来, 我们介绍和谱密度息息相关的一个概念: **态密度, density of states**. 我们之前说了, 谱密度告诉我们, 对于一个态  $|\psi\rangle$ , 它在不同能量处的分量有多大. 这里面就有一个观察: 对于  $|\psi\rangle$  来说, 长的和他自己越像 (交叠积分越大) 的本征态, 他在那个能量处的分量就越大. 所以谱密度还是在针对某个特定态  $|\psi\rangle$  来说的. 那么如果我们不针对某个特定态, 而是想知道, 在某个能量处, 有多少个本征态呢? 这就引出了态密度的概念.

#### 定义 5.2: 态密度, density of states

设  $\hat{H}$  的本征值为  $E_n$ , 本征态为  $|n\rangle$ . 我们考虑一组完备的正交归一化基底  $\{|\phi_i\rangle\}$ , 对于其中一个基底态  $|\phi_i\rangle$ , 我们定义他在能量  $E$  处谱密度为:

$$S_{|\phi_i\rangle}(E) = \langle \phi_i | \hat{\rho}(E) | \phi_i \rangle = \sum_n |\langle n | \phi_i \rangle|^2 \delta(E - E_n) \quad (263)$$

态密度就是这组基底态在能量  $E$  处的谱密度的总和:

$$N(E) = \sum_i S_{|\phi_i\rangle}(E) = \sum_{i,n} |\langle n | \phi_i \rangle|^2 \delta(E - E_n) \quad (264)$$

这一下就告诉我们,  $S_{|\phi_i\rangle}(E)$  是依赖于  $|\phi_i\rangle$  的, 而态密度  $N(E)$  则是和基底无关的. 实际上我们还能化简上述推导:

$$N(E) = \sum_{i,n} |\langle n | \phi_i \rangle|^2 \delta(E - E_n) = \sum_n \left( \sum_i |\langle n | \phi_i \rangle|^2 \right) \delta(E - E_n) = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (265)$$

也就是说, 我们把所有的满足能量为  $E$  的本征态  $|n\rangle$  都数了一遍, 这就是态密度. 这里面存在一个可能的疑惑: **难道不是一个对应每个  $E$  都只有一个  $E_n$** . 这个答案就很简单了: 不是的, 很多体系的 Hamiltonian 都存在简并现象, 也就是说, 可能有多多个本征态对应同一个本征值, 而且  $n$  是用来编号本征态的, 不是编号能量的, 所以很有可能:

$$E_{n_1} = E_{n_2} = \dots = E_{n_k} = E \quad (266)$$

就是说, 态  $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |k\rangle$  都对应同一个能量  $E$ . 所以态密度就是告诉我们, 在某个能量  $E$  处, 有多少个本征态. 从这个角度上说, 谱密度是针对某个态的, 而态密度则是针对整个体系的.

现在我们把所有的内容串一下, 首先我们注意到, 频域推迟格林函数为 (算符形式, 我们忽略了那个  $\sim$ , 然后标上了算符标志):

$$\hat{G}^R(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - \hat{H} + i\eta} \quad (267)$$

从而我们的谱密度 (spectral density operator) 就是:

$$\hat{\rho}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \hat{G}^R(E) \quad (268)$$

态  $|\psi\rangle$  的谱密度就是:

$$S_{|\psi\rangle}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \psi | \hat{G}^R(E) | \psi \rangle \quad (269)$$

态密度就是:

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} \hat{G}^R(E) \quad (270)$$

这里面的  $\text{Tr}$  是算符的迹运算, 定义为:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_i \langle \phi_i | \hat{A} | \phi_i \rangle \quad (271)$$

其中  $\{|\phi_i\rangle\}$  是一组完备的正交归一化基底.

最后, 我们再讲一个非常有用的例子. 我们之前定义了任意态的谱密度为:

$$S_{|\psi\rangle}(E) = \langle \psi | \hat{\rho}(E) | \psi \rangle = \langle \psi | \delta(E - \hat{H}) | \psi \rangle \quad (272)$$

我们自然是可以选择位置本征态  $|\mathbf{x}\rangle$  作为态  $|\psi\rangle$  的, 就相当于, 我们把一个探针放到空间中的某个位置  $\mathbf{x}$ , 然后测量这个位置处的谱密度. 这就是所谓的**局域态密度, local density of states**:

$$\rho(\mathbf{x}, E) = S_{|\mathbf{x}\rangle}(E) = \langle \mathbf{x} | \delta(E - \hat{H}) | \mathbf{x} \rangle \quad (273)$$

利用本征谱展开, 我们有:

$$\rho(\mathbf{x}, E) = \sum_n |\langle n | \mathbf{x} \rangle|^2 \delta(E - E_n) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{x})|^2 \delta(E - E_n) \quad (274)$$

其中  $\psi_n(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | n \rangle$  是本征态  $|n\rangle$  在位置空间的波函数表示. 局域态密度告诉我们, 在位置  $\mathbf{x}$  处, 能量为  $E$  时候, 我们找到例子的概率密度有多大. **注意啊, 局域态密度和态密度是不同的概念, 态密度是针对整个体系的, 而局域态密度是针对空间中的某个位置的.** 同样的, 我们也可以把局域态密度和格林函数联系起来:

$$\rho(\mathbf{x}, E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \mathbf{x} | \hat{G}^R(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) | \mathbf{x} \rangle \quad (275)$$

这就是说, 如果我们知道了格林函数在位置空间的表示 (对角元), 那么我们就可以计算出局域态密度.

这个理论在凝聚态物理中有非常重要的应用, 比如扫描隧道显微镜 (STM) 的工作原理, 就是基于局域态密度的测量. 我们有一个尖端, 把它放到样品表面附近, 然后施加一个小的电压. 电子会从尖端隧道到样品表面, 隧道电流的大小, 就和样品表面的局域态密度成正比. 通过扫描尖端的位置, 我们就可以得到样品表面的局域态密度分布, 从而得到样品的表面结构信息. 他可以直接固定电流, 然后扫描  $\mathbf{x}$ , 记录下不同位置处的电压, 直接反映出电子云的整体形状. 他还可以固定位置, 然后扫描电压, 记录下不同电压下的电流, 直接反映出局域态密度随能量的分布情况, 这就是 scanning tunneling spectroscopy (STS). 这样一旦看到了格林函数的虚部, 我们就能直接得到局域态密度, 进而得到很多有用的信息.

## A 复数, Cauchy 积分, Laurent 级数和留数定理

我们首先可以考虑一个点的邻域, 也就是复平面上的一個小圆盘. 假设  $z_0$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一个点,  $\epsilon$  是一个很小的正实数, 那么我们定义点  $z_0$  的  $\epsilon$  邻域为:

$$B(z_0, \epsilon) = \{z \in \mathbb{C} : |z - z_0| < \epsilon\} \quad (276)$$

也就是说, 点  $z$  在点  $z_0$  的  $\epsilon$  邻域内, 如果点  $z$  到点  $z_0$  的距离小于  $\epsilon$ .

有了这个邻域的概念, 我们可以定义内点, 就是内部的点. 如果  $S$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一个集合, 如果点  $z_0 \in S$ , 并且存在一个正实数  $\epsilon$ , 使得点  $z_0$  的  $\epsilon$  邻域  $B(z_0, \epsilon)$  完全包含在集合  $S$  中, 那么我们称点  $z_0$  是集合  $S$  的一个内点. 简单来说, 就是不仅点要在, 周围小伙伴也要在.

有了内点的概念, 我们就可以定义开集. 如果集合  $S$  中的每一个点都是集合  $S$  的内点, 那么我们称集合  $S$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一个开集. 也就是说, 集合  $S$  中的每一个点都有一个小圆盘完全包含在集合  $S$  中. 换句话说, 开集就是没有边界的集合. 一眼就能看出来, 如果我们想找一个这样的集合, 那么就不能是闭区间, 因为你选边界上的点, 他的小圆盘就会超出这个闭区间.

现在我们可以介绍连通集的概念. 如果集合  $S$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一个开集. 并且对于集合  $S$  中的任意两点  $z_1, z_2$ , 如果我们总是能画出一条连续的曲线  $\gamma$  链接他们, 并且这条曲线  $\gamma$  完全包含在集合  $S$  中, 那么我们称集合  $S$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一个连通集. 有个洞是完全 ok 的, 没有洞的连通集合我们称为单连通集. 有洞的连通集合我们称为多连通集.

从点到线, 我们可以讨论简单曲线的概念. 如果曲线  $\gamma$  的起点和终点重合, 并且曲线  $\gamma$  在除了起点和终点以外的地方没有自交, 那么我们称曲线  $\gamma$  是一条简单闭曲线. 简单意思就是, 自己不打结, 闭意思就是首尾相连.

有了简单闭曲线的概念, 我们就可以定义内部和外部了. 如果曲线  $\gamma$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一条简单闭曲线, 那么曲线  $\gamma$  将复平面  $\mathbb{C}$  分割成三个部分: 曲线  $\gamma$  本身, 曲线  $\gamma$  的内部有解区域, 以及曲线  $\gamma$  的外部无解区域.

有了明确的可以运算的区域之后, 我们就可以定义复变函数的运算求导了 (起码现在我们确保在一个开区间内, 任意一个点的邻域都是良好定义的了). 如果函数在  $z_0$  点处的可导, 那就是:

$$f'(z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{f(z) - f(z_0)}{z - z_0} \quad (277)$$

这个定义虽然可以和实变函数的导数定义类似, 但是复变函数的导数定义要严格得多. 在复平面中,  $\Delta z = \Delta x + i\Delta y$  要趋向于 0 意味着他应该在二维平面上任意方向趋向于 0, 这就比实变函数的导数定义要严格得多了. 复变函数在一点处可导, 要比实函数在一点处可导要求高得多.

可导只是在一个点上成立, 而解析或者全纯代表着在一个区域上都可导, 都是良好定义的, 光滑的. 一个函数在点  $z_0$  解析, 意味着函数  $f(z)$  在点  $z_0$  的某个邻域内的每一点都可导. 解析又被称为全纯的 (Holomorphic). 这样, 我们为什么定义开集就很重要了, 因为这避免了讨论边界点的问题, 从而保证了在点  $z_0$  的某个邻域内的每一点都可导 (因为不用讨论边界外面的东西了).

我们补充一个检查解析性的工具: Cauchy-Riemann 方程. 假设复变函数  $f(z)$  可以表示为:

$$f(z) = u(x, y) + iv(x, y) \quad (278)$$

其中  $u(x, y), v(x, y)$  是实变量  $x, y$  的实函数. 那么复变函数  $f(z)$  在点  $z_0 = x_0 + iy_0$  解析的必要条件是: 在  $z_0$  点处, 函数  $u(x, y), v(x, y)$  对变量  $x, y$  偏导数存在, 并且满足 Cauchy-Riemann 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \quad (279)$$

Cauchy-Riemann 方程给出了一个必要条件, 但是不是充分条件. 也就是说, 如果函数  $f(z)$  在点  $z_0$  解析, 那么他一定满足 Cauchy-Riemann 方程. 但是如果函数  $f(z)$  满足 Cauchy-Riemann 方程, 那么他不一定在点  $z_0$  解析. 还有个充分条件是, 如果函数  $u(x, y), v(x, y)$  在点  $z_0$  的一个邻域内, 四个偏导数:

$$\frac{\partial u}{\partial x}, \quad \frac{\partial u}{\partial y}, \quad \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \frac{\partial v}{\partial y} \quad (280)$$

都存在而且连续, 并且满足 Cauchy-Riemann 方程, 那么函数  $f(z)$  在点  $z_0$  解析.

当然, 我们是不能避免有坏点的. 如果一个函数  $f(z)$  在点  $z_0$  不解析, 但是在  $z_0$  任意小的邻域  $N(z_0, \epsilon)$  内总能找到  $f(z)$  解析的点, 那么我们称点  $z_0$  是函数  $f(z)$  的一个孤立奇点. 换句话说, 就是点  $z_0$  本身不解析, 但是点  $z_0$  的邻域内有解析的点存在. 举个例子:

$$f(z) = \frac{1}{z} \quad (281)$$

函数在点  $z = 0$  处不解析, 但是在点  $z = 0$  的任意小邻域内总能找到解析的点, 所以点  $z = 0$  是函数  $f(z) = \frac{1}{z}$  的一个孤立奇点.

有了这个概念, 我们就可以考虑到底有多坏了, 而极点 (pole) 就是一种坏得很有规律的奇点. 如果当点  $z$  趋近于点  $z_0$  时, 函数  $f(z)$  的极限趋向于无穷大, 那么我们称点  $z_0$  是函数  $f(z)$  的一个极点. 举个例子:

$$f(z) = \frac{1}{z} \quad (282)$$

函数在点  $z = 0$  是一个奇点, 当  $z \rightarrow 0$  时, 函数  $f(z)$  趋向于无穷大, 所以点  $z = 0$  是函数  $f(z) = \frac{1}{z}$  的一个极点. 在举个例子:

$$f(z) = \frac{1}{(z-i)^2} \quad (283)$$

函数在点  $z = i$  是一个奇点, 当  $z \rightarrow i$  时, 函数  $f(z)$  趋向于无穷大, 所以点  $z = i$  是函数  $f(z) = \frac{1}{(z-i)^2}$  的一个极点.

这种极点的坏是有规律的, 因为我们可以通过乘以一个适当的  $(z - z_0)^m$  因子来消除这个极点. 如果存在一个正整数  $m$ , 使得当点  $z$  趋近于点  $z_0$  时, 函数  $(z - z_0)^m f(z)$  的极限存在且有限, 那么我们称点  $z_0$  是函数  $f(z)$  的一个  $m$  阶极点. 举个例子:

$$f(z) = \frac{1}{(z-i)^2} \quad (284)$$

函数在点  $z = i$  是一个奇点, 当  $z \rightarrow i$  时, 函数  $f(z)$  趋向于无穷大, 所以点  $z = i$  是函数  $f(z) = \frac{1}{(z-i)^2}$  的一个极点. 并且我们可以看到, 当  $m = 2$  时, 当点  $z$  趋近于点  $z_0$  时, 函数  $(z - i)^2 f(z) = 1$  的极限存在且有限, 所以点  $z = i$  是函数  $f(z) = \frac{1}{(z-i)^2}$  的一个 2 阶极点.

我们考虑一个新的例子, 函数:

$$f(z) = e^{\frac{1}{z}} \quad (285)$$

函数在点  $z = 0$  处不解析, 并且在点  $z = 0$  的任意小邻域内总能找到解析的点, 所以点  $z = 0$  是函数  $f(z)$  的一个孤立奇点. 但是当点  $z$  沿着正实轴趋近于点  $z_0$  时,  $z = x \rightarrow 0^+$ , 函数  $f(z) = e^{\frac{1}{x}} \rightarrow +\infty$ .

而当点  $z$  沿着负实轴趋近于点  $z_0$  时,  $z = x \rightarrow 0^-$ , 函数  $f(z) = e^{\frac{1}{x}} \rightarrow 0$ . 所以奇点  $z = 0$  不是一个极点 ( $f(z)$  的值并不统一的趋向于无穷大), 所以他是不是一个极点. 这种乱的一塌糊涂的奇点我们称为本性奇点 (essential singularity). 还有什么样的奇点呢?

对于一个孤立奇点  $z_0$ , 我们可以通过讨论:

$$\lim_{z \rightarrow z_0} f(z) \quad (286)$$

的行为, 就可以对这个奇点进行分类. 如果满足如下条件:

$$\lim_{z \rightarrow z_0} f(z) = L, \quad L \in \mathbb{C} \quad (287)$$

那么他就是一个可去奇点 (removable singularity). 如果满足:

$$\lim_{z \rightarrow z_0} f(z) = \infty \quad (288)$$

那么他就是一个极点 (pole). 如果以上两个条件都不满足, 而且是不趋于有限值的奇点, 那么他就是一个本性奇点 (essential singularity).

现在我们可以介绍积分这个概念了, 因为我们已经有了区域的概念, 也有了曲线的概念. 假设曲线  $\gamma$  是复平面  $\mathbb{C}$  上的一条光滑曲线, 并且复变函数  $f(z)$  在曲线  $\gamma$  上连续, 那么我们定义复变函数  $f(z)$  沿着曲线  $\gamma$  的积分为:

$$\int_{\gamma} f(z) dz = \int_a^b f(z(t)) z'(t) dt \quad (289)$$

其中参数  $t$  的取值范围是  $t \in [a, b]$ , 并且曲线  $\gamma$  可以参数化为  $z = z(t)$ . 但是我们必须小心闭曲线的方向问题. 如果曲线  $\gamma$  是一条简单闭曲线, 那么我们规定, 观察者顺着曲线  $\gamma$  的方向行走时, 曲线  $\gamma$  的内部区域总是在观察者的左手边.

有一个定理可以帮助我们化简积分的计算, 如果  $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$  在光滑曲线  $\gamma$  上连续, 那么复变函数  $f(z)$  必然沿着曲线  $\gamma$  可积, 并且有:

$$\int_{\gamma} f(z) dz = \int_{\gamma} (u dx - v dy) + i \int_{\gamma} (v dx + u dy) \quad (290)$$

这个定理可以帮助我们化简复变函数的积分转化为实变量的积分, 从而简化计算.

举个例子, 我们考虑的曲线  $\gamma$  是以  $z_0$  为圆心,  $r$  为半径的圆周, 而且  $n$  是一个整数. 那么我们的曲线可以写为:

$$\gamma: z = z_0 + re^{i\theta}, \quad \theta \in [0, 2\pi] \quad (291)$$

从而我们可以写出:

$$\int_{\gamma} \frac{1}{(z - z_0)^n} dz = \int_0^{2\pi} \frac{ire^{i\theta}}{r^{n+1}e^{i(n+1)\theta}} d\theta \quad (292)$$

立刻可以化简:

$$\int_0^{2\pi} \frac{i}{r^n e^{in\theta}} d\theta \quad (293)$$

如果  $n = 0$ , 那么我们可以得到:

$$\int_{\gamma} dz = 2\pi i \quad (294)$$

而如果  $n \neq 0$ , 那么我们可以得到:

$$\int_{\gamma} \frac{1}{(z - z_0)^n} dz = 0 \quad (295)$$

这个结果与  $r$  的取值无关, 而且与  $z_0$  的取值无关.

现在我们来讨论一个非常重要的定理: Cauchy-Goursat 定理. 假设函数  $f(z)$  在一个单联通区域  $D$  内解析, 那么对于区域  $D$  内的任意一条闭曲线  $\gamma$ ,  $f(z)$  沿着曲线  $\gamma$  的积分为零:

$$\oint_{\gamma} f(z) dz = 0 \quad (296)$$

单联通区域的意思是, 区域内没有洞. 处处解析的意思是, 区域内的每一个点都是解析点, 不能有奇点.

当然, 这太异想天开了, 不能处理一般情况:

$$\oint_{\gamma} \frac{f(z)}{z - z_0} dz \quad (297)$$

这个时候就需要到 Cauchy 积分公式了. 假设函数  $f(z)$  在一个单联通区域  $D$  内处处解析 (注意啊! 是  $f(z)$ ), 并且曲线  $\gamma$  是区域  $D$  内的一条简单闭曲线, 那么对于区域  $D$  内的任意一点  $z_0$  (注意, 点  $z_0$  不能在曲线  $\gamma$  上), 我们有:

$$\oint_{\gamma} \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0) \quad (298)$$

这个公式非常重要, 因为他把一个积分和函数值联系了起来. 举个例子:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{\sin z}{z} dz = \sin 0 = 0 \quad (299)$$

再比如:

$$\oint_{\gamma} \frac{1}{z+1} + \frac{2}{z-3} dz = 2\pi i + 2\pi i \times 2 = 6\pi i \quad (300)$$

还能进行推广:

$$\oint_{\gamma} \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz = \frac{2\pi i}{n!} f^{(n)}(z_0) \quad (301)$$

举个例子:

$$\oint_{\gamma} \frac{\cos(\pi z)}{(z-1)^5} dz = \frac{2\pi i}{4!} \left. \frac{d^4}{dz^4} \cos(\pi z) \right|_{z=1} = -\frac{\pi^5}{12} i \quad (302)$$

现在我们过渡到 Laurent 级数展开的研究, 在此之前, 实际上还有 Taylor 级数展开, 但是他主要是针对解析函数的展开, 而 Laurent 级数展开可以处理奇点的问题. 使用 Laurent 级数展开一个函数  $f(z)$  在  $z_0$  点的邻域内, 是不要求函数  $f(z)$  在点  $z_0$  解析的. 他唯一的要求是函数  $f(z)$  在点  $z_0$  的某个环形邻域内解析. 对于一个函数的展开为:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n (z - z_0)^n \quad (303)$$

其中系数为:

$$a_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz \quad (304)$$

有很多情况下我们可以用已知的 Taylor 级数展开来得到 Laurent 级数展开. 举个例子, 我们考虑函数:

$$f(z) = e^{\frac{1}{z}} \quad (305)$$

我们知道指数函数的 Taylor 级数展开为:

$$e^w = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{w^n}{n!} \quad (306)$$

所以我们可以得到:

$$e^{\frac{1}{z}} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{z^n} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} z^{-n} = 1 + \frac{1}{z} + \frac{1}{2!} \frac{1}{z^2} + \frac{1}{3!} \frac{1}{z^3} + \cdots \quad (307)$$

和标准的 Laurent 级数展开形式对比:

$$f(z) = c_{-n} z^{-n} + c_{-n+1} z^{-n+1} + \cdots + c_{-1} z^{-1} + c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \cdots \quad (308)$$

我们可以观察到:

$$c_{-1} = 1 \quad c_{-2} = \frac{1}{2!}, \quad c_{-3} = \frac{1}{3!}, \quad c_0 = 1, \quad c_n = 0 \quad (n \geq 1) \quad (309)$$

然后我们套用定义法:

$$c_{-1} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} f(z) dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} e^{\frac{1}{z}} dz = 1 \quad (310)$$

$$c_{-2} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} f(z) z dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} e^{\frac{1}{z}} z dz = \frac{1}{2!} \quad (311)$$

$$c_{-3} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} f(z) z^2 dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} e^{\frac{1}{z}} z^2 dz = \frac{1}{3!} \quad (312)$$

$$c_0 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{f(z)}{z} dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{e^{\frac{1}{z}}}{z} dz = 1 \quad (313)$$

这样我们可以在不做积分的情况下迅速通过 Laurent 级数展开的定义得到系数.

现在我们补充一下关于奇点特性的说明, 展开了 Laurent 级数之后, 我们可以通过负幂部分的系数来判断奇点的类型. 如果 Laurent 级数展开中负幂部分的系数全为零, 那么点  $z_0$  是一个可去奇点. 如果 Laurent 级数展开中负幂部分有有限项非零, 那么点  $z_0$  是一个极点, 如果有  $m$  项非零, 那么点  $z_0$  是一个  $m$  阶极点. 如果 Laurent 级数展开中负幂部分有无限项非零, 那么点  $z_0$  是一个本性奇点.

如果我们重点关注 Laurent 级数展开中的负幂部分:

$$f(z) = \cdots + c_{-3}(z - z_0)^{-3} + c_{-2}(z - z_0)^{-2} + c_{-1}(z - z_0)^{-1} + c_0 + c_1(z - z_0) + c_2(z - z_0)^2 + \cdots \quad (314)$$

我们有:

$$c_{-1} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} f(z) dz \quad (315)$$

这一项我们称为留数 (residue). 留数在计算复变函数的积分中起到了非常重要的作用. 假设函数  $f(z)$  在一个单联通区域  $D$  内解析, 并且曲线  $\gamma$  是区域  $D$  内的一条简单闭曲线. 如果区域  $D$  内有有限个孤立奇点  $z_1, z_2, \cdots, z_n$ , 那么我们有:

$$\oint_{\gamma} f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(f, z_k) \quad (316)$$

其中  $\text{Res}(f, z_k)$  表示函数  $f(z)$  在点  $z_k$  处的留数. 这个定理被称为留数定理 (residue theorem).

如果是一个奇点是可去奇点, 那么不用想了, 留数就是 0. 如果是一个本性奇点, 那么我们就正常展开 Laurent 级数, 找到  $c_{-1}$  就是留数. 如果是一个  $m$  阶极点, 那么我们有一个快速计算留数的方法:

$$\text{Res}(f, z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{1}{(m-1)!} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} [(z - z_0)^m f(z)] \quad (317)$$

举个例子:

$$\oint_{|z|=2} \frac{5z-2}{z(z-1)^2} dz \quad (318)$$

我们能立刻发现, 函数在点  $z=0$  和  $z=1$  处有奇点. 我们先观察  $z=0$  这个奇点, 我们此时的 Laurent 级数展开为:

$$\frac{5z-2}{z(z-1)^2} = \frac{5z-2}{z} \cdot \frac{1}{(z-1)^2} \quad (319)$$

展开后面的部分有一个常用技巧:

$$\frac{1}{1-z} = 1 + z + z^2 + z^3 + \dots \quad (320)$$

两侧对  $z$  求导, 我们可以得到:

$$\frac{1}{(1-z)^2} = 1 + 2z + 3z^2 + 4z^3 + \dots \quad (321)$$

所以我们可以得到:

$$\frac{5z-2}{z(z-1)^2} = \left(5 - \frac{2}{z}\right) (1 + 2z + 3z^2 + 4z^3 + \dots) \quad (322)$$

从而我们可以得到:

$$1 - \frac{2}{z} + 4z + \dots \quad (323)$$

所以我们可以看到, 在点  $z=0$  处的留数为:

$$\text{Res}(f, 0) = -2 \quad (324)$$

接下来我们观察  $z=1$  这个奇点, 我们考虑如下代换:

$$w = z - 1 \Rightarrow z = w + 1 \quad (325)$$

那么我们有:

$$\frac{5z-2}{z(z-1)^2} = \frac{3+5w}{(w+1)w^2} = \left(\frac{3}{w^2} + \frac{5}{w}\right) \cdot \frac{1}{w+1} \quad (326)$$

展开后我们可以得到:

$$\frac{3}{w^2} + \frac{2}{w} + \dots \quad (327)$$

转回来:

$$\frac{3}{(z-1)^2} + \frac{2}{z-1} + \dots \quad (328)$$

从而我们确定, 在点  $z_0=1$  是一个二阶极点, 并且留数为:

$$\text{Res}(f, 1) = -2 \quad (329)$$

当然我们也可以利用我们之前的定理:

$$\text{Res}(f, 1) = \lim_{z \rightarrow 1} \frac{d}{dz} \left[ (z-1)^2 \frac{5z-2}{z(z-1)^2} \right] = \lim_{z \rightarrow 1} \frac{d}{dz} \left( \frac{5z-2}{z} \right) = \lim_{z \rightarrow 1} \frac{-2}{z^2} = -2 \quad (330)$$

最后我们可以得到:

$$\oint_{|z|=2} \frac{5z-2}{z(z-1)^2} dz = 0 \quad (331)$$

现在我们可以介绍对于我们来说最重要的应用: 实积分的计算. 这个技巧得益于解析延拓 (analytic continuation) 的概念. 什么是解析延拓呢? 我们先介绍一下这种情况: 有的时候我们知道函数在区间  $A$  上的值 (比如实数轴), 我们也知道他在另一个区域  $B$  上的值 (比如虚轴), 但是我们不知道他在连接  $A$  和  $B$  的区域  $C$  上的值 (比如复平面上的某个区域). 我们自然的会问, 我们从  $A$  区域把函数延拓到  $B$  区域, 如果延拓过去的结果和我们在  $B$  区域知道的结果一样, 那我们就说他们其实是同一个函数, 只是我们在不同区域看到了他不同的表现形式而已.

还有一个情况, 就是说我们的函数使用积分或者级数定义的, 但是这个级数只是在某个区域内收敛, 那么我们就可以通过解析延拓的方式把这个级数延拓到更大的区域. 我们举个例子, 我们考虑如下的幂级数:

$$f(z) = 1 + z + z^2 + z^3 + \dots \quad (332)$$

这个级数在  $|z| < 1$  的区域内收敛, 并且我们可以得到:

$$F(z) = \frac{1}{1-z} \quad (333)$$

函数  $f(z)$  在复平面上除了点  $z = 1$  以外的地方都是解析的. 从而我们就说:  $F(z)$  是  $f(z)$  在  $|z| < 1$  区域的解析延拓.

在这个情况下, 我们自然的会问:  $z = 2$  时候,  $f(z)$  和  $F(z)$  取值也不一样啊, 那么我们说  $F(z)$  是  $f(z)$  的解析延拓, 这合理吗? 答案是合理的, 因为解析延拓的定义并不是说两个函数在所有地方都一样, 而是说两个函数在他们都解析的区域内, 如果他们的值一样, 那么我们就说他们是同一个函数的不同表现形式.

级数只是函数的一种表现形式, 但是函数本身可能在更大的区域内解析. 你把  $z = 2$  带到  $f(z)$  里面, 那么你得到的结果是发散的, 但是他的实质是你在  $z = 2$  这个点上, 你使用的级数表现形式不适用而已, 而且  $F(z)$  在  $z = 2$  这个点上是良好定义的.

当然, 这个定理的成功之处来自于唯一性定理. 如果两个函数  $f(z), g(z)$  在一个连通区域  $D$  内解析, 并且在区域  $D$  内的一个包含无穷多个点的子集中, 对应的函数值相等, 那么在区域  $D$  内的每一个点上, 函数值都相等:

$$f(z) = g(z), \quad \forall z \in D \quad (334)$$

这个定理告诉我们, 如果我们能在一个区域内找到无穷多个点, 使得两个函数在这些点上值相等, 那么我们就可以断定这两个函数在整个区域内都是相等的. 对于我们来说, 唯一需要小心的就是, 有限个点上相等, 并不能说明两个函数在整个区域内相等. 另外, 一个不收敛的序列, 一般也不能说明两个函数在整个区域内相等.

现在有了这个解析延拓的概念, 我们就可以使用复变函数来计算实积分了. 假如我们有一个实函数  $f(x)$ , 并且我们想计算如下的实积分:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx \quad (335)$$

如果这个不好积分, 我们就可以考虑把他拓展到复平面上, 变成复变函数  $f(z)$ , 而且这个函数要和原来的函数在实轴上相等. 现在我们就要看看这个积分上下限的问题了, 我们必须在全部实轴上覆盖, 所以不如考虑一个闭合的曲线, 这个闭合曲线包含实轴的一部分, 然后在复平面上绕一个大圆

弧回到实轴上 (我们想用留数定理, 所以必须是闭合曲线). 然后我们对着围道积分就可以了, 就是用了留数定理.

但是我们现在要拆回去, 我们不想要大圆弧的贡献, 就是:

$$I_{AC} = \int_{\text{Path1}} F(z) dz + \int_{\text{Path2}} F(z) dz = 2\pi i \sum \text{Res}(F, z_k) = I + \int_{\text{Path2}} F(z) dz \quad (336)$$

其中 Path1 是实轴上的路径, Path2 是大圆弧路径. 我们扔掉大圆弧路径的贡献, 需要用到一个 ML 不等式: 一个复积分的大小, 不会超过路径长度乘以被积函数在路径上的最大值. 如果我们能让大圆弧路径的贡献在半径趋向于无穷大的时候趋向于 0, 那么我们就可以得到长度是  $L = \pi R$ , 被积函数的最大值是  $M$ , 那么我们就有:

$$\left| \int_{\text{Path2}} F(z) dz \right| \leq \pi R \cdot M \quad (337)$$

如果我们能让  $M$  的衰减速度比  $R$  的增长速度快, 那么我们就能让大圆弧路径的贡献在半径趋向于无穷大的时候趋向于 0. 这样我们就能得到:

$$I = 2\pi i \sum \text{Res}(F, z_k) \quad (338)$$

换句话说,  $F(z)$  只要满足比如  $1/R$  更快的衰减速度, 我们就能用留数定理来计算实积分. 还有一个很常用的, 对于我们帮助更大的, 就是如下的被积函数形式:

$$F(z) = G(z)e^{i\alpha z} \quad (339)$$

其中  $\alpha > 0$ . 如果  $G(z)$  在大圆弧路径上满足  $|G(z)| \rightarrow 0$  当  $R \rightarrow \infty$ , 那么我们就能让大圆弧路径的贡献在半径趋向于无穷大的时候趋向于 0. 无论多慢都行, 比如  $1/\ln R$  也行. 这就是 Jordan 引理.

第一类积分就是关于三角函数的:

$$I = \int_0^{2\pi} R(\cos \theta, \sin \theta) d\theta \quad (340)$$

我们的方法就是考虑如下的复变函数:

$$z = e^{i\theta} \Rightarrow dz = ie^{i\theta} \quad (341)$$

在用上:

$$\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} = \frac{z^2 - 1}{2iz}, \quad \cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} = \frac{z^2 + 1}{2z} \quad (342)$$

这一下子就变成了:

$$I = \oint_{|z|=1} R\left(\frac{z^2+1}{2z}, \frac{z^2-1}{2iz}\right) \frac{1}{iz} dz = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(F, z_k) \quad (343)$$

第二类积分是关于无穷区间的:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} R(x) dx \quad (344)$$

这个我们就得用最大值估计了: 分母的次数至少比分子的次数大 2, 而且  $R(x)$  在实轴上没有孤立奇点的. 这样我们画个大圆弧, 然后用留数定理就行了. 一般来说  $R(z)$  形式满足:

$$R(z) = \frac{z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_n}{z^m + b_1 z^{m-1} + \cdots + b_m} \quad m \geq n + 2 \quad (345)$$

从而积分为:

$$\int_{-R}^{+R} R(x) dx + \int_{\text{Arc}} R(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(R, z_k) \quad (346)$$

稳定的扔掉大弧贡献, 然后让  $R \rightarrow \infty$ , 我们就能得到:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} R(x) dx = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(R, z_k) \quad (347)$$

接下来就要用 Jordan 引理处理第三类积分了:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} R(x) e^{i\alpha x} dx \quad \alpha > 0 \quad (348)$$

要求  $R(x)$  在实轴上没有孤立奇点, 并且分母的次数至少比分子的次数大 1. 我们同样画个大圆弧, 然后用留数定理就行了. 积分为:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} R(x) e^{i\alpha x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} R(x) \cos(\alpha x) dx + i \int_{-\infty}^{+\infty} R(x) \sin(\alpha x) dx = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(R e^{i\alpha z}, z_k) \quad (349)$$

我们现在举几个例子来讨论一下上面介绍的方法的应用:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+x^2} dx \quad (350)$$

我们考虑复变函数:

$$F(z) = \frac{1}{1+z^2} = \frac{1}{(z-i)(z+i)} \quad (351)$$

函数在点  $z=i$  和  $z=-i$  处有孤立奇点, 并且这两个奇点都是一阶极点. 我们选择闭合曲线为上半平面的大圆弧加上实轴. 应用留数定理, 我们有:

$$\oint_{\gamma} F(z) dz = 2\pi i \text{Res}(F, i) \quad (352)$$

我们计算留数:

$$\text{Res}(F, i) = \lim_{z \rightarrow i} (z-i) F(z) = \lim_{z \rightarrow i} \frac{z-i}{(z-i)(z+i)} = \lim_{z \rightarrow i} \frac{1}{z+i} = \frac{1}{2i} \quad (353)$$

所以我们有:

$$\oint_{\gamma} F(z) dz = 2\pi i \cdot \frac{1}{2i} = \pi \quad (354)$$

分母次数比分子次数大 2, 所以我们可以稳定的扔掉大圆弧的贡献, 从而我们得到:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+x^2} dx = \pi \quad (355)$$

还有一个非常经典的例子:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos x}{1+x^2} dx \quad (356)$$

我们考虑复变函数:

$$F(z) = \frac{e^{iz}}{1+z^2} \quad (357)$$

函数在点  $z = i$  和  $z = -i$  处有孤立奇点, 并且这两个奇点都是一阶极点. 我们选择闭合曲线为上半平面的大圆弧加上实轴. 应用留数定理, 我们有:

$$\oint_{\gamma} F(z) dz = 2\pi i \operatorname{Res}(F, i) \quad (358)$$

我们计算留数:

$$\operatorname{Res}(F, i) = \lim_{z \rightarrow i} (z - i)F(z) = \lim_{z \rightarrow i} \frac{z - i}{(z - i)(z + i)} e^{iz} = \lim_{z \rightarrow i} \frac{e^{iz}}{z + i} = \frac{e^{-1}}{2i} \quad (359)$$

所以我们有:

$$\oint_{\gamma} F(z) dz = 2\pi i \cdot \frac{e^{-1}}{2i} = \pi e^{-1} \quad (360)$$

这个圆弧被扔掉完全来自于 Jordan 引理, 从而我们得到:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos x}{1 + x^2} dx = \pi e^{-1} \quad (361)$$

唯一需要注意的, 就是我们必须取闭合曲线为上半平面的大圆弧加上实轴, 不能取下半平面的大圆弧加上实轴, 否则 Jordan 引理不成立. 如果那个 Fourier 因子小于 0, 那么就得取下半平面的大圆弧加上实轴了 (这样指数因子才能衰减).