普通の Green 関数（伝搬関数）の話 (誤植修正版)

桑原　幸朗

2015/11/18

ここではハミルトニアンがエルミートである、つまり普通の話で考える。（ただし、捕捉ポテンシャルのある、つまり非一様系で考える。よくある教科書は一様系なので、そういう意味では普通ではないけれど・・・。）また、面倒なので一次元で考える。

時間依存 Schrödinger 方程式

$$i\partial_t \Psi(x,t) = H\Psi(x,t) \tag{1}$$

に従う $\Psi(x,t)$ を考える。このとき、$\Psi(x,t)$ と $\Psi(x',t')$ の間には以下の関係がある：

$$\Psi(x,t) = \int dx' G(x,t;x',t')\Psi(x',t') \tag{2}$$

ただし

$$G(x,t;x',t') \equiv \sum_\ell \varphi_\ell(x) e^{-iE_\ell(t-t')}\varphi_\ell^*(x') \tag{3}$$

であり、$\{\varphi_\ell(x)\}$ はハミルトニアン H の固有関数である：

$$H\varphi_\ell(x) = E_\ell \varphi_\ell(x) \tag{4}$$

以下で式 (2) を示す：
式 (1), (4) より

$$\Psi(x,t) = \sum_\ell c_\ell e^{-iE_\ell t}\varphi_\ell(x) \tag{5}$$

を得る。ただし

$$c_\ell \equiv \int dx \varphi_\ell^*(x)\Psi(x,0) \tag{6}$$

である。式 (3), (5), (6) を式 (2) に代入すれば、式 (2) の等式を示せる。（証明終了）

ところで、式 (3) は抽象表示 ($\varphi_\ell(x) \equiv \langle x|\varphi_\ell\rangle$) を使って書き直すと

$$\begin{aligned}
G(x,t;x',t') &= \sum_\ell \langle x|\varphi_\ell\rangle e^{-iE_\ell(t-t')} \langle \varphi_\ell|x'\rangle && (7)\\
&= \sum_\ell \langle x|e^{-iE_\ell(t-t')}|\varphi_\ell\rangle \langle \varphi_\ell|x'\rangle && (8)\\
&= \sum_\ell \langle x|e^{-iH(t-t')}|\varphi_\ell\rangle \langle \varphi_\ell|x'\rangle && (9)\\
&= \langle x|e^{-iH(t-t')}|x'\rangle && (10)
\end{aligned}$$

である。（ネットや教科書だと Green 関数を $G(x,t;x',t') \equiv \langle x|e^{-iH(t-t')}|x'\rangle$ で導入することがあるので参考までに。）（つまり）式 (3) は Green 関数または伝搬関数と呼ばれる関数である。（本当は伝搬関数の方が意味が通じやすい。$G(x,t;x',t')$ は $\Psi(x',t')$ を $\Psi(x,t)$ へ伝搬する関数だからである。ただし、面倒なのでここでは一貫して Green 関数と呼ぶことにする。）

さて、式 (3)（または式 (10) など）を見ると

$$G(x,t;x',t') = G(x,x';t-t') \tag{11}$$

であることがわかる。今後は $G(x,x';t-t')$ で表記する。$t-t'$ に依存した関数を見ると、Fourier 変換をしたくなるのが物理屋さんの性である。そのことを意識して式 (2) を $\tau \equiv t-t'$ で Fourier 変換する：

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\varepsilon\tau}\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\varepsilon\tau}\int dx' G(x,x';\tau)\Psi(x',t') \tag{12}$$

$$= \int dx' \sum_{\ell} \varphi_\ell(x)\left[\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\varepsilon - E_\ell)\tau}\right]\varphi_\ell^*(x')\Psi(x',t') \tag{13}$$

ここで、式 (13) の中の τ についての積分を取り出して計算する。（ただ、式 (13) には $\Psi(x',t')$ が含まれており、それなのに τ についての積分だけ取り出して計算していいのだろうか？この疑問に答えるために、まず式 (2) を見直す。すると、右辺は t' に依存しているが左辺は t' に依存していないことがわかる。つまり、t' はこの式の上では変数ではなくパラメータとして扱われていると思えばよい。なら、最初から t_0 とかそれっぽく表記すれば余計な混乱を招かなくて良い。ただ、ここではなんとなく「Green 関数を $t-t'$、つまり相対時間について Fourier 変換する」というニュアンスを強めたかった。あと、修正するのが面倒だったので・・・。）

式 (13) の中の τ についての積分をする前に、因果 Green 関数 $G_\ell(\tau)$、遅延 Green 関数 $G_\ell^R(\tau)$、先進 Green 関数 $G_\ell^A(\tau)$ を導入する。（因果 Green 関数は「因果」を付けないことがあるが、ここではなるべく付けることにする。）

$$G_\ell(\tau) \equiv -ie^{-iE_\ell\tau} \tag{14}$$

$$G_\ell^R(\tau) \equiv -i\theta(\tau)e^{-iE_\ell\tau} \tag{15}$$

$$G_\ell^A(\tau) \equiv i\theta(-\tau)e^{-iE_\ell\tau} \tag{16}$$

このとき

$$G_\ell(\tau) = G_\ell^R(\tau) - G_\ell^A(\tau) \tag{17}$$

である。（前に話したとき遅延と先進を逆で説明してしまっていたが、よくよく知らべてみたら上の式が正しかった。）各 Green 関数の定義に含まれる係数 $\pm i$ は慣習で、大した意味はない。本題である「式 (13) の中の τ についての積分」とは、本質的には因果 Green 関数を Fourier 変換した

もの $G_\ell(\varepsilon) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\varepsilon\tau} G_\ell(\tau)$ である。また、$G_\ell(\varepsilon)$ は因果 Green 関数のスペクトル表示と呼ばれるものである。というわけで、$G_\ell(\varepsilon)$ を計算する：

$$
\begin{aligned}
iG_\ell(\varepsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\varepsilon - E_\ell)\tau} && (18) \\
&= \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\varepsilon - E_\ell)\tau} + \int_{-\infty}^{0} d\tau e^{i(\varepsilon - E_\ell)\tau} && (19) \\
&= \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\varepsilon - E_\ell)\tau - \eta\tau} + \int_{-\infty}^{0} d\tau e^{i(\varepsilon - E_\ell)\tau + \eta\tau} && (20) \\
&= i\left[\frac{1}{\varepsilon - E_\ell + i\eta} - \frac{1}{\varepsilon - E_\ell - i\eta}\right] && (21) \\
&\equiv i\left[G_\ell^R(\varepsilon) - G_\ell^A(\varepsilon)\right] && (22)
\end{aligned}
$$

式 (22) の一項目が遅延 Green 関数、二項目が先進 Green 関数のそれぞれスペクトル表示と呼ばれるものである。ただし、η は積分の収束因子である。すぐにわかることだけれど、$G_\ell^R(\varepsilon), G_\ell^A(\varepsilon)$ はそれぞれ $G_\ell^R(\tau), G_\ell^A(\tau)$ を τ について Fourier 変換したものである。（ここまで来て今更だけど、因果 Green 関数、遅延 Green 関数、先進 Green 関数の定義とかスペクトル表示の定義とかはわりとノリで述べている。ただ、本質は外していないはず。）

ここからは、Green 関数について取り留めもなく列挙していく。（ここから下もノリで話すので、読むときは慎重にお願いします。）

ε を複素数に拡張、つまりスペクトル表示の各 Green 関数を解析接続する。このとき、$G_\ell^R(\varepsilon), G_\ell^A(\varepsilon)$ は ε 平面においてそれぞれ上半面、下半面において正則であることがわかる。

さっきは「τ について Fourier 変換するのは物理屋さんの性」と適当なことを述べたけれど、それは単なる言葉のあやである。改めてスペクトル表示の Green 関数（因果、遅延、先進どれでもいいけれど）を見ると、Green 関数の極 $\varepsilon = E_\ell$ は分散関係を与えていることがわかる。

卒論と Green 関数の絡みをイメージしやすくするために以下の計算を行う：まず、式 (11) に気をつけながら、式 (2) の t' を $t' = 0$ にとる：

$$
\Psi(x,t) = \int dx' G(x,x';t)\Psi(x',0) \tag{23}
$$

次に、この式の両辺を t について $0 \sim \infty$ まで積分する：

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\infty} dt e^{i\varepsilon t}\Psi(x,t) &= \int_0^{\infty} dt e^{i\varepsilon t} \int dx' G(x,x';t)\Psi(x',0) && (24) \\
&= \int_0^{\infty} dt \int dx' \sum_\ell \varphi_\ell(x) \left[e^{i(\varepsilon - E_\ell)t}\right] \varphi_\ell^*(x')\Psi(x',0) && (25) \\
&= \int dx' \sum_\ell \varphi_\ell(x) \left[i\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\varepsilon t} G_\ell^R(t)\right] \varphi_\ell^*(x')\Psi(x',0) && (26)
\end{aligned}
$$

$$= \int dx' \sum_{\ell} \varphi_\ell(x) \left[iG^R_\ell(\varepsilon) \right] \varphi^*_\ell(x') \Psi(x', 0) \tag{27}$$

ここで、もう少しまとめるために

$$G^R(x, x'; \varepsilon) \equiv \sum_{\ell} \varphi_\ell(x) \left[iG^R_\ell(\varepsilon) \right] \varphi^*_\ell(x') \tag{28}$$

を導入すると、最終的に

$$\int_0^\infty dt e^{i\varepsilon t} \Psi(x, t) = \int dx' G^R(x, x'; \varepsilon) \Psi(x', 0) \tag{29}$$

を得る。

参考文献

[1] J. J. Sakurai, 現代の量子力学 (上) (吉岡書店, 1989).

[2] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, INC. New York, 2003).