Keldysh Green 関数

岡田 大 (Okada Masaru)

October 3, 2025

Abstract

非平衡な系を扱うときに有用な Keldysh Green 関数のメモ。

Keldysh Green 関数を次で定義する。

$$G_{\alpha\beta}(1,2) = i\Big\langle \hat{T}_c\Big[\tilde{\psi}_\alpha(\vec{r}_1,t_1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(\vec{r}_2,t_2)\Big]\Big\rangle_{\mathrm{st}} \tag{1}$$

（符号は Kopnin に従った。AGD とは逆になっている。）ここで用いた記法をそれぞれ説明する。まず統計平均 $\langle\cdots\rangle_{\mathrm{st}}$ は次のように定義されている。

$$\mathrm{Tr}\left[\exp\left(\frac{\Omega+\mu\hat{N}-\hat{\mathcal{H}}(t_0)}{T}\right)\left(\tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\right)\right] = \Big\langle\tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\Big\rangle_{\mathrm{st}} \tag{2}$$

変数は、$1=(\vec{r}_1,t_1)$ のような short hand notation を使った。また、$\tilde{\psi}_\alpha(1)$ は Heisenberg 演算子であり、

$$\tilde{\psi}_\alpha(\vec{r},t) = \hat{S}^{-1}(t,t_0)\tilde{\psi}_\alpha(\vec{r},t_0)\hat{S}(t,t_0) \tag{3}$$

と定義される。S 行列は

$$\hat{S}(t,t_0) = \hat{T}_t\exp\left[-i\int_{t_0}^{t}(\hat{\mathcal{H}}-\mu\hat{N})dt'\right] \tag{4}$$

時刻 $t=t_0$ のとき温度は T であるとする。非平衡の相互作用が印加される時刻は $t_0=-\infty$ であり、$t_0=\max\{t_1,t_2\}$ まで相互作用は印加され続ける。このときの時間軸を正の向きに走る経路を c_1 とする。逆に $t_0=\max\{t_1,t_2\}$ から $t_0=-\infty$ まで逆向きに走る経路を c_2 とし、全ての経路を $c=c_1+c_2$ と定義する。（これは Keldysh 経路と呼ばれるが、最初に考案したのは J. Schwinger である。）さらに全 Keldysh 経路 c に沿って定義される不等号 $>_c$、$<_c$ を導入し、Keldysh 経路上における時間順序積 $\hat{T}_c$ を

$$\hat{T}_c\Big[\tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\Big] = \begin{cases} \tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2), & (t_1 >_c t_2) \\ \mp\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\tilde{\psi}_\alpha(1), & (t_1 <_c t_2) \end{cases} \tag{5}$$

と定義する。複合は上がフェルミオン、下がボゾンである。

新しく次の 2 つの Green 関数も定義する。

$$G^{>}_{\alpha\beta}(1,2) = i\left\langle \tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\right\rangle_{\mathrm{st}} \tag{6}$$

$$G^{<}_{\alpha\beta}(1,2) = \mp i\left\langle \tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\tilde{\psi}_\alpha(1)\right\rangle_{\mathrm{st}} \tag{7}$$

これを用いると、

$$G_{\alpha\beta}(1,2) = \begin{cases} G^{>}_{\alpha\beta}(1,2), & (t_1 >_c t_2) \\ G^{<}_{\alpha\beta}(1,2), & (t_1 <_c t_2) \end{cases} \tag{8}$$

と書ける。これらの関数を行列要素に持つ関数を次のように定義する。

$$\underline{\check{\mathrm{G}}} = \begin{pmatrix} G^{11} & G^{12} \\ G^{21} & G^{22} \end{pmatrix} \tag{9}$$

この 4 成分の関数が成す空間は Keldysh 空間と呼ばれる。成分はそれぞれ

$$\begin{cases} G^{11}(1,2) &= & i\left\langle \hat{T}_t\left[\tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\right]\right\rangle_{\mathrm{st}} \\ G^{12}(1,2) &= & G^{<}_{\alpha\beta}(1,2) \\ G^{21}(1,2) &= & G^{>}_{\alpha\beta}(1,2) \\ G^{22}(1,2) &= & i\left\langle \hat{\tilde{T}}_t\left[\tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\right]\right\rangle_{\mathrm{st}} \end{cases} \tag{10}$$

(2,2) 成分の $\hat{\tilde{T}}_t$ は反時間順序積であり、

$$\hat{\tilde{T}}_t\left[\tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\right] = \begin{cases} \tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2), & (t_1 < t_2) \\ \mp\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\tilde{\psi}_\alpha(1), & (t_1 > t_2) \end{cases} \tag{11}$$

と定義される。

通常の Green 関数法と同様に retarded Green 関数と advanced Green 関数をそれぞれ次のように定義する。

$$G^{R}_{\alpha\beta}(1,2) = i\theta(t_1 - t_2)\left\langle \tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2) \pm \tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\tilde{\psi}_\alpha(1)\right\rangle_{\mathrm{st}} \tag{12}$$

$$G^{A}_{\alpha\beta}(1,2) = -i\theta(t_2 - t_1)\left\langle \tilde{\psi}_\alpha(1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(2) \pm \tilde{\psi}^\dagger_\beta(2)\tilde{\psi}_\alpha(1)\right\rangle_{\mathrm{st}} \tag{13}$$

これらに加えて Keldysh Green 関数

$$G^{K}_{\alpha\beta}(1,2) = G^{<}_{\alpha\beta}(1,2) + G^{>}_{\alpha\beta}(1,2) \tag{14}$$

も定義する。これら 3 つの関数はさっきの Keldysh 空間の行列 $\underline{\check{\mathrm{G}}}$ の成分を用いて、

$$G^R = G_{11} - G_{12} \quad = \quad G_{21} - G_{22} \tag{15}$$

$$G^A = G_{11} - G_{21} \quad = \quad G_{12} - G_{22} \tag{16}$$

$$G^K = G_{12} + G_{21} \quad = \quad G_{11} + G_{22} \tag{17}$$

と表すこともできる。従って、次のように Keldysh 変換（Keldysh 回転）と呼ばれる操作を行うと、

$$\check{G} = \check{L}\check{\tau}_3\underline{\check{G}}\check{L}^{\mathrm{T}} \quad = \quad \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix} \tag{18}$$

のような表式が得られる。ただし、

$$\check{L} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{1} - i\check{\tau}_2) \tag{19}$$

と置いた。G^{ij}（ここで $i, j = 1, 2$）はそれぞれ従属しているが、これら G^R、G^A、G^K はそれぞれ互いに独立である。非平衡 Green 関数を扱う場合、この行列 $\check{G}$ の基底の取り方が便利であり、標準的である。

Keldysh Green 関数を用いて相互作用が印加された場合のフェルミオンの粒子数 N を数える。

$$\begin{aligned} N &= \sum_\alpha \left\langle \tilde{\psi}^\dagger_\alpha(1)\tilde{\psi}_\alpha(1) \right\rangle_{\mathrm{st}} \\ &= i\sum_\alpha G^<_{\alpha\alpha}(1,1) \end{aligned} \tag{20}$$

これを次の恒等式

$$\lim_{t_1\to t_2}\left[G^>_{\alpha\beta}(1,2) - G^<_{\alpha\beta}(1,2)\right] = i\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\delta_{\alpha\beta} \tag{21}$$

と式 (14) を用いて、

$$\lim_{t_1\to t_2} G^<_{\alpha\beta}(1,2) = \frac{1}{2}\lim_{t_1\to t_2} G^K_{\alpha\beta}(1,2) - i\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\delta_{\alpha\beta} \tag{22}$$

であることを用いると、相互作用が入っていない場合の粒子数を N_0 として $N = N_0 + \delta N$ と書くと、

$$N = N_0 + \frac{i}{2}\lim_{(\vec{r}_1,t_1)\to(\vec{r}_2,t_2)}\sum_\alpha \delta G^K_{\alpha\alpha}(1,2) \tag{23}$$

と書ける。ここで δG^K は同時刻における Green 関数の跳びを表し、

$$\delta G^K = G^R - G^A \quad = \quad G^> - G^< \tag{24}$$

と置き換えることができる。また、

$$G^K(1,2) = \int\frac{d\varepsilon\ d\omega}{(2\pi)^2}\frac{d^3\vec{p}\ d^3\vec{k}}{(2\pi)^6}e^{-i\varepsilon(t_1-t_2)}e^{-i\omega(t_1+t_2)}e^{i\vec{p}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)}e^{i\vec{k}(\vec{r}_1+\vec{r}_2)/2}\ \ G^K_{\varepsilon_+,\varepsilon_-}(\vec{p}_+,\vec{p}_-) \tag{25}$$

このようにフーリエ変換すると、

$$N(\omega,\vec{k}) = N_0 - \frac{i}{2}\sum_\alpha \int \frac{d\varepsilon}{2\pi}\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} G^K_{\varepsilon_+,\varepsilon_-}(\vec{p}_+,\vec{p}_-) \tag{26}$$

と表すこともできる。ここで表記の簡単のために $\vec{p}_\pm = \vec{p} \pm \frac{\vec{k}}{2}$、$\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \frac{\omega}{2}$ と書いた。

従来の Green 関数法と同様に Dyson 方程式も構成することができる。無摂動の Green 関数を $G^{(0)}_\varepsilon$ と書いて、

$$G^{(0)}_\varepsilon = \frac{1}{\xi_{\vec{p}} - \varepsilon} \tag{27}$$

と定義する。$\xi_{\vec{p}}$ は 1 粒子のバンド分散を表す。外部ポテンシャル $\check{U}(\vec{r},t)$ が印加されたとき、$\check{U}$ の一次までで、

$$G^{ik^{(1)}}(1,1') = -\int d^3\vec{r}_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2\ G^{ij^{(0)}}(1,2)U^{jl}(2)G^{lk^{(0)}}(2,1') \tag{28}$$

[*1]

$i,j,k = 1,2$ を表す。ここで外部ポテンシャルは、Pauli 行列 $\check{\tau}_i$ を用いて

$$\check{U} = U\check{\tau}_3 \quad = \quad \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & -U \end{pmatrix} \tag{29}$$

のような構造を持っているものと仮定した。行列成分の添字と積分記号を抜いて、

$$\underline{\check{\mathrm{G}}}^{(1)} = -\underline{\check{\mathrm{G}}}^{(0)}\check{U}\underline{\check{\mathrm{G}}}^{(0)} \tag{30}$$

と書いて、2 次、3 次、$\cdots$、と続けていくと all order で

$$\underline{\check{\mathrm{G}}} = \underline{\check{\mathrm{G}}}^{(0)} - \underline{\check{\mathrm{G}}}^{(0)}\check{U}\underline{\check{\mathrm{G}}} \tag{31}$$

と書けることが分かる。Keldysh 回転を施すと、

$$\check{G} = \check{G}^{(0)} - \check{G}^{(0)}(U\check{1})\check{G} \tag{32}$$

相互作用の無い場合の Green 関数の逆演算子

$$\check{G}^{(0)^{-1}} = -i\partial_t + \xi_{\vec{p}} \tag{33}$$

を用いて、

$$(\check{G}^{(0)^{-1}} + U)\check{G} = \check{1} \tag{34}$$

[*1] ただし、この時間は Keldysh 経路ではなく、通常と同様に負から正に向かう時間発展をする。

と、従来と同様に書ける。以上は、例えば不純物散乱などに応用できる枠組みであるが、フォノンとの相互作用 and/or 電子間相互作用が印加された場合であっても同様に、自己エネルギーも Keldysh 形式で導入することができて次のように書き直せる。(フォノンの場合を別のノートにまとめる。) [Rammer and Smith(1986)]

$$(\check{G}^{(0)^{-1}} + \check{\Sigma})\check{G} = \check{1}, \qquad \check{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix} \tag{35}$$

付録として、無摂動の Green 関数の表現をそれぞれ示す。(符号の定義は AGD と逆になっていることに注意する。)

$$\begin{pmatrix} G^{11}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) & G^{12}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) \\ G^{21}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) & G^{22}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) \end{pmatrix} \tag{36}$$

$$= \begin{pmatrix} \dfrac{1}{\xi_{\vec{p}} - (\varepsilon + i0)} \mp 2\pi i n_{\vec{p}} \delta(\xi_{\vec{p}} - \varepsilon) & \pm 2\pi i n_{\vec{p}} \delta(\xi_{\vec{p}} - \varepsilon) \\ -2\pi i (1 \mp n_{\vec{p}}) \delta(\xi_{\vec{p}} - \varepsilon) & -\dfrac{1}{\xi_{\vec{p}} - (\varepsilon - i0)} \mp 2\pi i n_{\vec{p}} \delta(\xi_{\vec{p}} - \varepsilon) \end{pmatrix} \tag{37}$$

$$\begin{pmatrix} G^{R}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) & G^{K}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) \\ G^{A}{}^{(0)}_{\varepsilon}(\vec{p}) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{\xi_{\vec{p}} - (\varepsilon + i0)} & -2\pi i n_{\vec{p}} \delta(\xi_{\vec{p}} - \varepsilon) \\ \dfrac{1}{\xi_{\vec{p}} - (\varepsilon - i0)} & 0 \end{pmatrix} \tag{38}$$

また、BCS 超伝導状態にも拡張することができる。Green 逆演算子を次のように定義すれば良い。

$$\check{G}_{\varepsilon}^{-1}(\vec{p} - \vec{k}_1, \varepsilon_1) = \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} - \varepsilon & 0 \\ 0 & \xi_{\vec{p}} + \varepsilon \end{pmatrix} (2\pi)^4 \delta(\varepsilon_1) \delta(\vec{k}_1) + \check{H}_{\varepsilon_1} \tag{39}$$

$$\check{H}_{\varepsilon_1} = \begin{pmatrix} -\dfrac{e}{c}\vec{v}_{\mathrm{F}}\vec{A}(\vec{k}) + e\phi & -\Delta(\vec{k}) \\ \Delta^*(\vec{k}) & \dfrac{e}{c}\vec{v}_{\mathrm{F}}\vec{A}(\vec{k}) + e\phi \end{pmatrix} \tag{40}$$