グリーン関数の形式論

Kazuhito Mizuyama

2013 年 8 月 26 日

グリーン関数とは物理学で幅広く利用されている極めて重要な関数である。分野によって「プロパゲーター」と呼ばれることもあり、数学用語では「レゾルベント」と呼ばれたりもする。主に摂動をわかりやすく扱う目的で用いられ、ファインマン図でその取り込んだ効果を視覚的にわかりやすく表現することができるということでも知られている。

1 グリーン関数とリップマン・シュウィンガー方程式

厳密なハミルトニアンが $\widehat{H}$ で与えられているとする。一般に量子多体系において与えられたハミルトニアンに対するシュレーディンガー方程式は厳密に解くことはできない。そのため必ず近似が必要となる。

厳密なシュレーディンガー方程式を

$$\widehat{H}|\Psi(E)\rangle = E|\Psi(E)\rangle \tag{1}$$

とする。

何かしらの近似方法 (例えば量子多体系で有名な第ゼロ近似手法として有名なものにハートリー・フォック法等) を用いると

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V} \tag{2}$$

のように、ハミルトニアンを第ゼロ近似部分 $\widehat{H}_0$ とそれ以外の部分 $\widehat{V}$(残留相互作用、residual force) にわけることができる。この時、解くことができる近似的な方程式として

$$\widehat{H}_0|\Phi(E)\rangle = E|\Phi(E)\rangle \tag{3}$$

が与えられる。$|\Psi(E)\rangle$ は $|\Phi(E)\rangle$ と $\widehat{H}_0$ を用いて

$$|\Psi(E)\rangle = |\Phi(E)\rangle + \frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}|\Psi(E)\rangle \tag{4}$$

と表すことができる。このような方程式の事をリップマン・シュウィンガー方程式と呼ぶ。$\frac{1}{E-\widehat{H}_0}$ は第ゼロ近似のグリーン関数 (非摂動グリーン関数) である。

(4) は次のように逐次的に展開することができる。

$$\begin{aligned}|\Psi(E)\rangle &= |\Phi(E)\rangle + \frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}|\Psi(E)\rangle \\ &= |\Phi(E)\rangle + \frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}|\Phi(E)\rangle + \frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}\frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}|\Phi(E)\rangle + \cdots\end{aligned} \tag{5}$$

残留相互作用 $\widehat{V}$ の展開個数 (次数) に応じ、”n 次の摂動” と呼ぶ。

2 グリーン関数の定義とダイソン方程式

非摂動グリーン関数を

$$\widehat{G}_0(E) \equiv \frac{1}{E-\widehat{H}_0} \tag{6}$$

と定義すると $\widehat{G}_0$ はその定義から

$$\left(E-\widehat{H}_0\right)\widehat{G}_0(E)=1 \tag{7}$$

を満たす。また、

$$\widehat{G}(E)\equiv\frac{1}{E-\widehat{H}} \tag{8}$$

と定義すれば $\widehat{G}$ もまた

$$\left(E-\widehat{H}\right)\widehat{G}(E)=1 \tag{9}$$

を満たす。

ところで、$\widehat{G}$ が

$$\widehat{G}(E)=\widehat{G}_0(E)+\widehat{G}_0(E)\widehat{V}\widehat{G}(E) \tag{10}$$

を満たす。このグリーン関数と非摂動グリーン関数との間の方程式をダイソン方程式と呼ぶ。ダイソン方程式は次のように逐次的に展開できる。

$$\begin{aligned}\widehat{G}(E)&=\widehat{G}_0(E)+\widehat{G}_0(E)\widehat{V}\widehat{G}(E)\\&=\widehat{G}_0(E)+\widehat{G}_0(E)\widehat{V}\widehat{G}_0(E)+\widehat{G}_0(E)\widehat{V}\widehat{G}_0(E)\widehat{V}\widehat{G}_0(E)+\cdots \qquad (11)\\&=\frac{1}{E-\widehat{H}_0}+\frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}\frac{1}{E-\widehat{H}_0}+\frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}\frac{1}{E-\widehat{H}_0}\widehat{V}\frac{1}{E-\widehat{H}_0}+\cdots \qquad (12)\end{aligned}$$

これを (5) に適用すればリップマン・シュウィンガー方程式は

$$|\Psi(E)\rangle=|\Phi(E)\rangle+\frac{1}{E-\widehat{H}}\widehat{V}|\Phi(E)\rangle=|\Phi(E)\rangle+\widehat{G}(E)\widehat{V}|\Phi(E)\rangle \tag{13}$$

と表現することができる。

3 時間依存形式のグリーン関数

時間依存のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\widehat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{14}$$

に対応する時間依存のグリーン関数は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\widehat{H}\right)\widehat{G}(t,t')=\delta(t-t') \tag{15}$$

を満たす関数として定義される。この方程式の形式解は

$$\widehat{G}(t,t')=e^{-i\widehat{H}(t-t')/\hbar}\theta(t-t') \tag{16}$$

第ゼロ近似に関する時間依存形式の非摂動グリーン関数も同様で

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Phi(t)\rangle=\widehat{H}_0|\Phi(t)\rangle \tag{17}$$

に対応する時間依存の非摂動グリーン関数は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\widehat{H}_0\right)\widehat{G}_0(t,t')=\delta(t-t') \tag{18}$$

を満たす関数として定義される。この方程式の形式解は

$$\widehat{G}_0(t,t')=e^{-i\widehat{H}_0(t-t')/\hbar}\theta(t-t') \tag{19}$$

となる。