Green 関数とは

永井佑紀

平成 17 年 10 月 3 日* †

目的は、「Green 関数のありがたみを知ること」である。

1　第二量子化における物理量の計算

1.1　第二量子化のおさらい

まず、生成消滅演算子を導入する。生成演算子 $a_k^\dagger$ は、真空状態に作用させたとき、ある量子数 k を持つ軌道に電子をひとつ生成する役割を持つ。つまり、

$$a_k^\dagger |0\rangle = |k\rangle \tag{1}$$

とする。粒子数演算子を

$$n_k = a_k^\dagger a_k \tag{2}$$

とする。このとき、$|k\rangle$ は規格化されており、

$$\langle k||k'\rangle = \delta_{kk'} \tag{3}$$

であり、$\langle x|k\rangle = \varphi_k(x)$ とする。

また、ある場所 x に粒子を生成消滅させる場の演算子

$$\psi(x) = \sum_k a_k \varphi_k(x) \tag{4}$$

を導入する。これは、形式的には一粒子波動関数と同じであるが、係数 a_k が演算子であるところが異なっている。ある場 ϕ に存在する全粒子数を求める演算子は

$$N = \sum_k a_k^\dagger a_k \tag{5}$$

である。ここで、

$$\psi^\dagger(x)\psi(x) = \sum_k \sum_{k'} a_k^\dagger a_{k'} \varphi_k^*(x)\varphi_{k'}(x) \tag{6}$$

であるから、式 (3) より

$$\int \sum_k \sum_{k'} a_k^\dagger a_{k'} \varphi_k^*(x)\varphi_{k'}(x) dx = \sum_k \sum_{k'} a_k^\dagger a_{k'} \delta_{kk'} \tag{7}$$

$$= \sum_k a_k^\dagger a_k \tag{8}$$

$$N = \int \psi^\dagger(x)\psi(x) dx \tag{9}$$

*平成 18 年 1 月 23 日　第二量子化のおさらいに誤りがあったので訂正。

†平成 18 年 9 月 6 日　細かなミスを訂正。

となり、全粒子数演算子を場の演算子で書くことができた。以上のことから考えて、ある物理量を求める演算子 Q は、一粒子あたりの物理量の演算子 q を用いて

$$Q = \int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})q(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{10}$$

と定義することが可能である。ここで、空間は三次元であるとした。この定義が妥当であるかどうかは、期待値をとったときに、多体の量子力学の期待値と等しくなるかどうかをみることで判断することができる。

1.2 基底状態での期待値

式 (10) の基底状態での期待値、あるいは統計力学的な平均値 $\langle Q\rangle$ は

$$\begin{aligned}\langle Q\rangle &= \langle\int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})q(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\rangle & (11)\\ &= \int d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r'}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})q(\boldsymbol{r})\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r'})\psi(\boldsymbol{r})\rangle & (12)\end{aligned}$$

である。ここで、$\psi^\dagger(\boldsymbol{r'})$ と $q(\boldsymbol{r})$ は変数が違うために、期待値の外へ出すことができた[1]。この期待値が多体の量子力学の期待値と等しいという証明は、「新物理学シリーズ　物性研究者のための場の量子論 I」に載っている。

2 Green 関数の定義

2.1 基底状態における Green 関数

Heisenberg 表示の演算子 $A(t)$、$B(t')$ に対して、

$$G_{AB}(t',t') = -i\langle\mathrm{T}[A(t)B(t')]\rangle \tag{13}$$

で定義される。ここで T は時間順序積であり、左から右へと時間 t が減っていくように並べる。Fermi 粒子では、

$$\mathrm{T}[(A_1A_2\ldots A_n] = (-1)^P A_jA_k\ldots A_m \tag{14}$$

である。$t_m < \ldots < t_k < t_j$ であり、P は時間順序に置き換える際に必要なフェルミ粒子演算子同士の置換回数である。演算子が二つのみの場合は、

$$\mathrm{T}[A(t)B(t')] = A(t)B(t')\theta(t-t') \mp B(t')A(t)\theta(t'-t) \tag{15}$$

とかける。第二項の因子 $\mp$ は、Bose 粒子であれば $+$、Fermi 粒子であれば $-$ である。また、θ 関数はステップ関数であり、

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x>0)\\ 0 & (x<0)\end{cases} \tag{16}$$

である。

式 (13) の両辺を t で微分してみよう。すると、

$$\begin{aligned}-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}(t,t') &= \langle\delta(t-t')A(t)B(t') \mp \delta(t-t')B(t')A(t) + \frac{i}{\hbar}\{[H,A(t)]B(t')\theta(t-t') \mp B(t')[H,A(t)]\theta(t'-t)\}\rangle\\ &= \delta(t-t')\langle[A(t),B(t')]_\mp\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\mathrm{T}[[H,A(t)]B(t')]\rangle & (17)\\ & & (18)\end{aligned}$$

[1]清水研の松崎雄一郎氏との議論を参考にした。

となり[2]、移項して整理すると、

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}(t,t') + \frac{i}{\hbar}\langle \mathrm{T}[[A(t),H]B(t')]\rangle = \delta(t-t')\langle [A(t),B(t')]_{\mp}\rangle \tag{19}$$

となる。ここで、$[A,B]_{\mp}$ の $-$ は Bose 型の演算子、$+$ は Fermi 型の演算子の場合である。

演算子を、$A=\psi(\boldsymbol{r})$、$B=\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r})$ と、場の演算子にとったときを考える。この場合の Green 関数を $\boldsymbol{r},t$ を x、また $\boldsymbol{r}',t'$ を x' として、単に $G(x,x')$ と書くことにする。すると式 (19) の右辺は

$$\delta(t-t')\langle [\psi(\boldsymbol{r}),\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')]_{\mp}\rangle = \delta(t-t')\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \delta(x-x') \tag{20}$$

となる。また、

$$\frac{1}{\hbar}[\psi(\boldsymbol{r}),H] = L\psi(\boldsymbol{r}) \tag{21}$$

と書けば、式 (19) は

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-L\right)G(x,x') = \delta(x-x') \tag{22}$$

となる。ここで、数学的な意味での Green 関数 $G(x,y)$ の定義を考える。数学では、

$$L\left(\frac{d}{dx},x\right)f(x) = u(x) \tag{23}$$

という x の関数 $f(x)$ に対する線形微分方程式があるときに、

$$LG(x,y) = \delta(x-y) \tag{24}$$

を満たす $G(x,y)$ を L の Green 関数とよんだ。物理的な意味での Green 関数は、Schrodinger 方程式

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-L\right)\psi(x) = 0 \tag{25}$$

の数学的な意味での Green 関数の形をしている。しかし、一般に相互作用のある場合は、L は ψ について線形ではないので、(23) に対する Green 関数とは異なっている。もし、粒子間に相互作用がなければ、L は ψ について線形となり、式 (25) は自由な波動場の方程式になる。そして、式 (22) は $G(x,x')$ がその数学的意味での Green 関数になっていることを示している。ここで、数学的な意味での Green 関数 $G(x,y)$ は y から出る波、または y に入る波の x の振幅を表しており、波の伝播関数と呼ばれることもある。また、相互作用がある場合でも、

$$G(x-x') = -i\langle \mathrm{T}[\psi(x)\psi^{\dagger}(x')]\rangle \tag{26}$$

は x' で生じた粒子が x で消えるまでのふるまいを表しており、この意味で粒子の伝播関数という意味を持っている。

また、式 (19) の方程式を満たすものは G_{AB} だけとは限らず、たとえば次の関数

$$G^{\mathrm{R}}_{AB}(t,t') = -i\langle [A(t),B(t')]_{\mp}\rangle\theta(t-t') \tag{27}$$

$$G^{\mathrm{A}}_{AB}(t,t') = i\langle [A(t),B(t')]_{\mp}\rangle\theta(t'-t) \tag{28}$$

も満たしている。G^{R} は $t<t'$ では 0 で、$t>t'$ でのみ 0 ではない。つまり、t' におきたこと (B) がそれより後の時刻 t で A に与える影響を表しており、**遅延 Green 関数**(retarded Green function) と呼ばれている。G^{A} はこれとは逆で**先進 Green 関数**(advanced Green function) と呼ばれている。これらは G と密接な関係にある。

[2] θ 関数を微分すると δ 関数になることを用いた。

2.2　有限温度における Green 関数

有限温度では、基底状態における期待値のかわりに、密度演算子

$$\rho = e^{-\beta(H-\mu N)}/\Xi, \qquad \Xi = \mathrm{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}] \tag{29}$$

を使った平均値を使えばよい。この ρ を使った平均を

$$\mathrm{Tr}[\rho \cdots] = \langle \cdots \rangle \tag{30}$$

と表せば、式 (27)、式 (28) と全く同じ式で $\mathcal{G}^{\mathrm{R}}$、$\mathcal{G}^{\mathrm{A}}$ が定義できる。この二つと数学的に密接な関係のあるものは、ただ単に密度演算子を用いて平均値をとったものではなく、時間の変数を $t = -i\tau$、$t' = -i\tau'$ として τ、τ' としたものがある。つまり、

$$A(\tau) = e^{\tau K/\hbar} A e^{-\tau K/\hbar} \tag{31}$$

$$K = H - \mu N \tag{32}$$

として、

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau, \tau') = -\langle \mathrm{T}_\tau [A(\tau) B(\tau')] \rangle \tag{33}$$

を使うと便利なことが多い。これを**温度 Green 関数**(thermal Green function) と呼ぶ。

また、温度 Green 関数は次の方程式を満たしている。

$$-\frac{\partial}{\partial \tau}\mathcal{G}(x, x') = \delta^{(4)}(x - x') - \langle \mathrm{T}_\tau [[K, \psi(x)] \psi^\dagger(x')] \rangle \tag{34}$$

3　Green 関数を使っての物理量の計算

物理量を Green 関数を用いて表すことを考える。物理量は、式 (12) で表されている。Green 関数の定義は式 (13) であり、温度 Green 関数は式 (33) であるから、式 (15) を用いると、物理量 Q の平均値 $\langle Q \rangle$ は

$$\langle Q \rangle = \pm i \int d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r}' \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') q(\boldsymbol{r}) \lim_{t' \to t+} G(rt : r't') \tag{35}$$

$$\langle Q \rangle = \mp \int d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r}' \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') q(\boldsymbol{r}) \lim_{\tau' \to \tau+} \mathcal{G}(r\tau : r'\tau') \tag{36}$$

と書くことができる。ここで、上符号は Fermi 粒子、下符号は Bose 粒子である。また、$\lim_{t' \to t+}$ は t' を t より大きくとって t に近づける意味であり、$\lim_{\tau' \to \tau+}$ についても同様である。これを単に、

$$\langle Q \rangle = \pm i \int d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r}' \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') q(\boldsymbol{r}) G(rt : r't+) \tag{37}$$

$$\langle Q \rangle = \mp \int d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r}' \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') q(\boldsymbol{r}) \mathcal{G}(r\tau : r'\tau+) \tag{38}$$

と書くこともある。

このように、場の演算子を二個含む形で表すことのできる物理量は、Green 関数を知ることで平均値を計算することができる。知りたい系はたいてい有限温度の系であるから、温度 Green 関数を知ることができれば系のさまざまな性質を調べることができる。

参考文献

高野文彦、「多体問題」(培風館　新物理学シリーズ 18)

J. M. ザイマン、"現代量子論の基礎" (丸善プラネット株式会社)

Richard D. Mattuck. "A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem" 2nd (Dover)

Nikolai Kopnin."Theory of Nonequilibrium Superconductivity" (Oxford Science Publications)

A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinski "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics" (Dover)