Green 関数の求めかた

永井佑紀

平成 16 年 9 月 29 日

Green 関数を使うと物理量を計算できる、というところまでが前回のノートの内容である。このノートでの目的は、「ではどうやって Green 関数を求めるか」である。このノートにおける Green 関数とは、特に断りがなければ、すべて温度 Green 関数を表すことにし、その表記を G とする。また、$\hbar = 1$ である単位系を用いる。

1 自由粒子の Green 関数

相互作用のない系における Green 関数を求めることにする。Green 関数の定義は、

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2) = -\langle \mathrm{T}_\tau[\tilde{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}_1,\tau_1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(\boldsymbol{r}_2,\tau_2)]\rangle \tag{1}$$

である。ここで $\tilde{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)$ は

$$\tilde{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r},\tau) = e^{(\mathcal{H}-\mu\mathcal{N})\tau}\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)e^{-(\mathcal{H}-\mu\mathcal{N})\tau} \tag{2}$$

である。時間順序積 T を用いずにもう少し具体的に書くと、

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2) = \langle -\tilde{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}_1,\tau_1)\tilde{\psi}^\dagger_\beta(\boldsymbol{r}_2,\tau_2)\theta(\tau_1-\tau_2) \pm \tilde{\psi}^\dagger_\beta(\boldsymbol{r}_2,\tau_2)\tilde{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}_1,\tau_1)\theta(\tau_2-\tau_1)\rangle \tag{3}$$

と書くことができる。また、

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\boldsymbol{p},\alpha}\hat{n}_{\boldsymbol{p},\alpha}\epsilon_0(\boldsymbol{p}),\ \ \hat{\mathcal{N}} = \sum_{\boldsymbol{p},\alpha}\hat{n}_{\boldsymbol{p},\alpha} \tag{4}$$

とする。ここで $\hat{n}_{\boldsymbol{p},\alpha} = a^\dagger_{\boldsymbol{p}\alpha}a_{\boldsymbol{p}\alpha}$ である。このとき、生成消滅演算子は以下の関係を満たす。

$$e^{(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}a_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau} = a_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{-(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)\tau} \tag{5}$$

$$e^{(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}a^\dagger_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau} = a^\dagger_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)\tau} \tag{6}$$

この関係式の証明を以下に示す。
左辺を τ で微分すると

$$\frac{d}{d\tau}\left(e^{(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}a_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}\right) = e^{(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}[(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}}),a_{\boldsymbol{p}\alpha}]e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau} \tag{7}$$

$$= e^{(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}\left[\sum_{\boldsymbol{p}',\alpha}a^\dagger_{\boldsymbol{p}\alpha}a_{\boldsymbol{p}\alpha}(\epsilon_0(\boldsymbol{p}')-\mu),a_{\boldsymbol{p}\alpha}\right]e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau} \tag{8}$$

$$= -(\epsilon_0(\boldsymbol{p}')-\mu)e^{(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau}a_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0-\mu\hat{\mathcal{N}})\tau} \tag{9}$$

となる。この微分方程式は簡単に解く事ができる。よって、式 (5) が証明できた。同様な手順で式 (6) も証明できる。

ここで、規格化された場の演算子

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}},\ \ \psi^\dagger_\alpha(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}\alpha}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{10}$$

を用意する。$\tau=\tau_1-\tau_2>0$ のとき温度 Green 関数は

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2)=-\frac{1}{V}\langle\sum_{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\alpha,\beta}e^{i(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)}e^{(\mathcal{H}_0-\mu\mathcal{N})\tau}a_{\boldsymbol{p}_1\alpha}e^{-(\mathcal{H}_0-\mu\mathcal{N})\tau}a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}_2\beta}\rangle \tag{11}$$

となる。式 (5)、式 (6) を用い、$\langle\cdots\rangle$ が Gibbs の統計平均であることに注意して計算すると

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2)=-\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\alpha,\beta}e^{i(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)}e^{-(\epsilon_0(\boldsymbol{p}_1)-\mu)\tau}\langle a_{\boldsymbol{p}_1\alpha}a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}_2\beta}\rangle \tag{12}$$

となる。ここで、$\langle a_{\boldsymbol{p}_1\alpha}a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}_2\beta}\rangle\neq 0$ であるのは、$\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{p}_2$、$\alpha=\beta$ のときだけであるから、

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2)=-\frac{1}{V}\delta_{\alpha\beta}\sum_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)}e^{-(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)\tau}\langle a_{\boldsymbol{p}\alpha}a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}\alpha}\rangle \tag{13}$$

となる。また、Gibbs の統計平均は

$$\langle a_{\boldsymbol{p}\alpha}a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}\alpha}\rangle=\langle 1\mp a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}\alpha}a_{\boldsymbol{p}\alpha}\rangle=1\mp\langle a^{\dagger}_{\boldsymbol{p}\alpha}a_{\boldsymbol{p}\alpha}\rangle=1\mp n(\boldsymbol{p}) \tag{14}$$

と書くことができる。ここで上符号は Fermion、下符号は Boson である。また、$n(\boldsymbol{p})$ は

$$n(\boldsymbol{p})=\begin{cases}\left(e^{\beta(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)}+1\right)^{-1} & \text{Fermion}\\ \left(e^{\beta(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)}-1\right)^{-1} & \text{Boson}\end{cases} \tag{15}$$

である。以上から、$V\to\infty$ として和を積分に直すと、$\tau>0$ のときの一粒子温度 Green 関数：

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2)=-\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\boldsymbol{p}\,e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)-(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)\tau}[1\mp n(\boldsymbol{p})] \tag{16}$$

を得ることができる。また、$\tau<0$ の温度 Green 関数は

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1;\boldsymbol{r}_2,\tau<0) = \mp G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1;\boldsymbol{r}_2,\tau+\beta>0) \tag{17}$$

$$= \pm\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\boldsymbol{p}\,e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)-(\epsilon_0(\boldsymbol{p})-\mu)\tau}n(\boldsymbol{p}) \tag{18}$$

と書くことができる。ここで、$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1;\boldsymbol{r}_2,\tau<0)=\mp G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1;\boldsymbol{r}_2,\tau+\beta>0)$ という温度 Green 関数の性質を用いた。

この性質の証明は以下に示す。

$\tau<0$ における密度演算子を用いた温度 Green 関数の定義は、

$$G(\tau<0)=\mp\mathrm{Tr}[e^{-\beta K}\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')e^{K\tau}\psi(\boldsymbol{r})e^{-K\tau}]/\Xi \tag{19}$$

である。ここで

$$\mathrm{Tr}[ABC]=\mathrm{Tr}[CAB]=\mathrm{Tr}[BCA] \tag{20}$$

を用いれば、

$$G(\tau<0) = \mp\mathrm{Tr}[e^{-\beta K}e^{K(\tau+\beta)}\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')e^{-K(\tau+\beta)}\psi(\boldsymbol{r})]/\Xi \tag{21}$$

$$= \pm G(\tau+\beta>0) \tag{22}$$

となる。証明終。

2 Wick の定理

Wick の定理は、非常に重要であり使える定理である。

複数の演算子を含む相互作用のない系での統計平均を考える。

$$\langle\mathrm{T}_{\tau}\left(\tilde{\psi}(1)\tilde{\psi}(2)\ldots\tilde{\psi}^{\dagger}(3)\tilde{\psi}^{\dagger}(4)\ldots\right)\rangle \tag{23}$$

それぞれの場の演算子は規格化されているとする。そのとき上式は生成消滅演算子で表すと、

$$\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{n}\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{m}\cdots\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{n'}\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{m'}\cdots \times\langle \mathrm{T}_{\tau}\left(a_n(\tau_1)a_m(\tau_2)\ldots a^{\dagger}_{n'}(\tau_3)a^{\dagger}_{m'}(\tau_4)\ldots\right)\rangle \tag{24}$$

という形になっている。統計平均は密度行列演算子を用いて書かれている。したがって、その行列要素が零ではない項が寄与をする。生成演算子と消滅演算子が同じ数だけ出てくるような行列要素は零ではない。たとえば、

$$\frac{1}{V}\sum_{n}\frac{1}{V}\sum_{m\neq n}\cdots\langle \mathrm{T}_{\tau}\left(a_n(\tau_1)a_m(\tau_2)\ldots a^{\dagger}_{n}(\tau_3)a^{\dagger}_{m}(\tau_4)\ldots\right)\rangle \tag{25}$$

のように、二つの生成消滅演算子が同じ量子状態におかれている行列要素は零ではない。このときすべての添え字は異なるとする。また、これの n と m の場所を置き換えて得られる行列要素も零ではない。他にも、

$$\frac{1}{V}\sum_{n}\frac{1}{V}\sum_{m\neq n}\cdots\langle \mathrm{T}_{\tau}\left(a_n a_n a_m a_m\ldots a^{\dagger}_{n}a^{\dagger}_{n}a^{\dagger}_{m}a^{\dagger}_{m}\ldots\right)\rangle \tag{26}$$

のように、四つの生成消滅演算子が同じ量子状態におかれている行列要素は零ではない。どの場合も、生成消滅演算子の数だけ $1/V$ という因子が存在する。

最終的に巨視的な系の統計平均を得たいので、$V\to\infty$ である極限を考える。この極限をとるとき、量子状態に関する和は積分に直すことができる。つまり、

$$\frac{1}{V}\sum_{n}\cdots\to\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{p}\cdots \tag{27}$$

のような変形を行うことができる。式 (25) においては、和の数と因子 $1/V$ の数は一致している。しかし、式 (26) においては、和の数より因子 $1/V$ の数の方が多い。このため、式 (25) 以外の行列要素は、$V\to\infty$ で零になる。つまり、各量子状態の生成消滅演算子のトレースは、独立にとっても良いということになる。4 つの演算子が含まれている例で言えば、

$$\begin{aligned}\sum\nolimits^{(d)}\left[\mathrm{T}_{\tau}\exp\left(\beta(\Omega+\mu\hat{\mathcal{N}}-\hat{\mathcal{H}})\right)a_n a^{\dagger}_n a_m a^{\dagger}_m\right] &= \sum\nolimits^{(d)}\left[\mathrm{T}_{\tau}\exp\left(\beta(\Omega_n+\mu\hat{\mathcal{N}}_n-\hat{\mathcal{H}}_n)\right)a_n a^{\dagger}_n\right]\\ &\times \sum\nolimits^{(d)}\left[\mathrm{T}_{\tau}\exp\left(\beta(\Omega_m+\mu\hat{\mathcal{N}}_m-\hat{\mathcal{H}}_m)\right)a_m a^{\dagger}_m\right]\end{aligned} \tag{28}$$

となるのである。このとき $\sum^{(d)}$ は、あらゆる状態の和をとるという意味である。また、このような積で書くためには、ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ が各量子状態のハミルトニアン H_n の和で書ける必要がある。したがって、**相互作用のない系でなければ成り立たない。**相互作用がある系ではハミルトニアンに相互作用項があるために成り立たないのである。

また、上式を言い換えれば、ψ と $\psi^{\dagger}$ のペアが非常にたくさんあるときの時間順序積の統計平均は、可能なすべての $\psi\psi^{\dagger}$ の組み合わせの時間順序積の統計平均の和と等しい、ということである。このとき、各項の符号は、最初の組み合わせからその組み合わせまでの Fermi 演算子の置換回数が偶数であれば $+$、奇数であれば $-$ である。これが Wick の定理と呼ばれているものである。

たとえば、四つの演算子が含まれている場合は、

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{T}_{\tau}\left(\hat{\psi}(1)\hat{\psi}(2)\hat{\psi}^{\dagger}(3)\hat{\psi}^{\dagger}(4)\right)\rangle &= \langle \mathrm{T}_{\tau}\left(\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^{\dagger}(4)\right)\rangle\langle \mathrm{T}_{\tau}\left(\hat{\psi}(2)\hat{\psi}^{\dagger}(3)\right)\rangle\\ &\mp \langle \mathrm{T}_{\tau}\left(\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^{\dagger}(3)\right)\rangle\langle \mathrm{T}_{\tau}\left(\hat{\psi}(2)\hat{\psi}^{\dagger}(4)\right)\rangle\end{aligned} \tag{29}$$

となる。これは最初 $\{(1),(2),(3),(4)\}$ であった組み合わせが、第一項は 2 回の置換により $\{(1),(4),(2),(3)\}$ となり、第二項は 1 回の置換により $\{(1),(3),(2),(4)\}$ となっている。したがって第一項の符号は $+$、第二項は演算子が Fermion か Boson かによるので $\mp$ の符号がついている。

3 Green 関数に対する摂動展開

相互作用のある系での Green 関数は正確に求めることは不可能なので、いろいろな近似が必要になる。その中でまず考えられるのは摂動計算である。展開の各項は Feynmann グラフで表される。しかし、このノートでは煩雑になるためにまとめないことにする。

4 Green 関数の運動方程式を解く方法

Green 関数を近似的に求めるのに、その運動方程式を近似的に解く方法がある。以前のノートでも述べたように、Green 関数は次の方程式:

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}G(x,x') = \delta^{(4)}(x-x') - \langle \mathrm{T}_\tau[[K,\psi(x)]\psi^\dagger(x')]\rangle \tag{30}$$

を満たしている。相互作用をしている粒子系で、ハミルトニアンが

$$H = \int \psi^\dagger(\boldsymbol{r})h(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\int\int \psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r'})v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r'})\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r'} \tag{31}$$

という形をしているときを考える。まず、$\psi(\boldsymbol{r},t)$ は Heisenberg の運動方程式:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} &= -[H,\psi(\boldsymbol{r},t)] \qquad (32)\\ &= h(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t) + \int \psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t)v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)d\boldsymbol{r'}\psi(\boldsymbol{r},t) \qquad (33) \end{aligned}$$

を満たすので、

$$-[K,\psi(\boldsymbol{r})] = (h(\boldsymbol{r})-\mu)\psi(\boldsymbol{r},t) + \int \psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,t)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_1,t)d\boldsymbol{r_1}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{34}$$

を式 (30) に代入すると、

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\partial}{\partial\tau} - (h(\boldsymbol{r})-\mu)\right]G(x,x') &= \delta^{(4)}(x-x') - \int d^3\boldsymbol{r}_1 v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\\ &\quad\times\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,\tau)\psi(\boldsymbol{r}_1,\tau)\psi(\boldsymbol{r},\tau)\psi^\dagger(\boldsymbol{r'},\tau')]\rangle \qquad (35) \end{aligned}$$

となり、$(\boldsymbol{r},\tau)=x$ であることがわかるように書き直すと

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\partial}{\partial\tau} - (h(\boldsymbol{r})-\mu)\right]G(x,x') &= \delta^{(4)}(x-x') - \int d^3\boldsymbol{r_1} v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r_1})\\ &\quad\times\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,\tau)\psi(\boldsymbol{r}_1,\tau)\psi(x)\psi^\dagger(x')]\rangle \qquad (36) \end{aligned}$$

となる。変数は $x=(\boldsymbol{r},\tau)$ と $x'=(\boldsymbol{r}',\tau')$ である。

上式の右辺第二項の $\langle\cdots\rangle$ は 2 体の Green 関数と呼ばれる。これがわからない限り 1 体の Green 関数は求められない。2 体の Green 関数を求めるためにそれの運動方程式を作ると、相互作用のために 3 体の Green 関数が現れ、3 体の Green 関数の方程式を作ると 4 体が現れる。こうして方程式はどこまでも続いて閉じないため、正確に解く事はできない。この方程式を近似的に解くために、高次の Green 関数をなんらかの形で低次の Green 関数によって近似的に表し、閉じた形の方程式に変えてしまうということが行われている。

この近似解法は平均場近似の一種であると言える。たとえば、2 体の Green 関数を 1 体の Green 関数の積で表したとすると、2 体の相互作用ポテンシャルが消える。つまり、相互作用ポテンシャルの代わりに平均場を用いて 1 体問題に帰着させているのである。具体的に見ていくために、例として Hartree-Fock 近似での Green 関数について次節で考えることにする。[1]

[1] と上では書いたが、Fock 項に関する取り扱いがうまくいっていないことがわかったため、以下の節は公開停止とすることにする。

5 Hartree-Fock 近似

5.1 Hartree-Fock 近似のハミルトニアン

5.2 Hartree-Fock 近似の Green 関数

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)