講義ノート

二時間グリーン函数の理論とその応用(I)

松　原　武　生(京大理)

§1　序にかえて

京都大学の物理学科大学院学生のために，今春より多体問題の講義をはじめたが，編集部の希望でその概要を数回に分けてこの誌上に発表することになつた。京大における講義は現在も続行中の広い内容におよぶ予定のものであるが，この誌上にはともかくその一部の上記のような標題のものを紹介する。二時間グリーン函数は最近量子統計力学や固体論の諸問題にさかんに用いられて，かなりの成功をおさめ，次第にその計算法式が整備されて万能的処方箋がつくられつつあるような印象を与えている。しかし具体的な応用例で時々露呈するこの方法の欠点一主として系統的に基礎づけられた近似法が確立されていないためにおこる不明確さ一に対して今まで余り十分な検討がなされず，そのためにこの方法の有効性，信頼性について疑義を抱かさせられる点も皆無ではなかつた。この講義の目標はそのような問題点をできるだけ批判的に検討しながら，この方法を再整理して見ることであつたが，そのために講義者は聴講者からたえず疑問を提出してもらい，その疑問を解きほぐす努力を次の講義の内容に加えるといつた形式のくりかえしで講義がすすめられて来た。この精神は今回からはじまるこの講義ノートにも通じさせたいので，読者が抱かれる疑問を誌上を通じ，あるいは直接筆者に知らせて頂くことを希望する。

参考までに今まで京大でなされた講義の内容一覧を予め紹介しておく。紙数や体裁の加減でこのノートには異なる順序や，ちがつた組合せで現われるだろうが，とにかく〝予告篇〟の役割はしてくれると思う。

松　原　武　生

§2　グリーン函数

順序としてグリーン函数の定義，それから導かれる主要な性質を簡単に述べる。既にいくつかの教科書や綜合報告に詳しい記述が見られるようになつ

たから，後の議論に必要な程度の復習に止める。

定義　Heisenberg表示で表わした時間t，t'に依存する二つのオペレータ$A(t)$，$B(t')$から次のグリーン函数が定義される。

$$
\begin{array}{llll}
 & & t>t' & t<t' \\
\text{causal} & : G^{c}_{AB}(t,t')= & -\frac{i}{\hbar}<A(t)B(t')> & ,-\eta\frac{i}{\hbar}<B(t')A(t)> \\
\text{retarded} & : G^{r}_{AB}(t,t')= & -\frac{i}{\hbar}<[A(t)B(t')]>, & 0 \\
\text{advanced} & : G^{a}_{AB}(t,t')= & 0 & ,-\frac{i}{\hbar}<[A(t)B(t')]>
\end{array}
\qquad (2.1)
$$

但し系のハミルトニアンをH，粒子数N，chemical potentialをμ，$\mathrm{H}=H-\mu N$として

$$A(t)\equiv e^{i\mathrm{H}t/\hbar}Ae^{-i\mathrm{H}t/\hbar}$$

$$<\cdots\cdots>\equiv \mathrm{Tr}\,[e^{-\beta\mathrm{H}}\cdots]\,/\,\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta\mathrm{H}}]\equiv\frac{1}{Q}\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta\mathrm{H}}\cdots] \qquad (2.2)$$

$$\eta=\begin{cases}+1 & \text{Bose 型オペレータのとき} \\ -1 & \text{Fermi}\quad〃\end{cases} \quad [A,B]_{\mp}=AB\mp BA \quad \begin{array}{l}-\text{Bose 型}\\+\text{Fermi 型}\end{array}$$

で定義されている。

$$\theta(t)=\int_{-\infty}^{t}\delta(t)dt=\begin{cases}1 & t>0\\0 & t<0\end{cases} \qquad (2.3)$$

で定義される函数を用いるならば(2.1)は次のようにも書ける。

$$
\begin{aligned}
G^{c}_{AB}(t,t')&=-\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')<A(t)B(t')>-\eta\frac{i}{\hbar}\theta(t'-t)<B(t')A(t)> \\
G^{r}_{AB}(t,t')&=-\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\{<A(t)B(t')>-\eta<B(t')A(t)>\} \qquad (2.4)\\
G^{a}_{AB}(t,t')&=-\frac{i}{\hbar}\theta(t'-t)\{<A(t)B(t')>-\eta<B(t')A(t)>\}
\end{aligned}
$$

Causal グリーン函数は多時間の場合にも拡張できる。

$$G^{c}_{n}(t_{1}\cdots t_{n})=\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n}<\mathrm{T}\,[A_{1}(t_{1})\cdots\cdots A_{n}(t_{n})]> \qquad (2.1')$$

Tは$t_i > t_j > \cdots\cdots > t_R$の順序に並べる演算子。(2.4) の$G^r$と$G^a$を特に二時間グリーン函数と呼ぶ。二時間グリーン函数は$t-t'$のみの函数である。それはTrace がオペレーターの置換に対して不変であることから直ちに結論される。

$$<A(t)B(t')> = \frac{1}{Q}\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H}e^{itH/\hbar}Ae^{-itH/\hbar}e^{it'H/\hbar}Be^{-it'H/\hbar}]$$

$$= \frac{1}{Q}\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H}e^{i(t-t')H/\hbar}Ae^{-i(t-t')H/\hbar}B]$$

量子統計力学の問題では二時間グリーン函数で十分である。特にG^rとG^aががが一番有用である。それは後述するように，$t-t'$の函数として又そのフーリエ変換の解析的性質が簡単で数学的扱いが便利であるからであるが，一面近似的解法に際して，二時間に限つているために種々の困難が現われ，場合によつては (2. 1′) の多時間グリーン函数の方が便利な場合がおこる。

運動方程式

(2.4) をtで微分すると，$A(t)$に対するHeisenbergの方程式

$$i\frac{dA}{dt} = \frac{1}{\hbar}[A, H]$$

および (2.3) の$\theta(t)$の性質をつかつてGに対する運動方程式がつくれる。その形は三種のグリーン函数に対して全く同形で，(2.4) の両辺を三種のグリーン函数に共通に

$$G_{AB}(t-t') = \langle\langle A(t) : B(t')\rangle\rangle \qquad (2.5)$$

で表わせば，運動方程式は次の形にまとめられる。

$$i\hbar\frac{dG_{AB}(t-t')}{dt} = \delta(t-t')<[A(t), B(t')]_{\mp}> + \langle\langle [A(t), H]_{-}, B(t')\rangle\rangle \qquad (2.6)$$

形式的にこれを

$$\left[i\hbar\frac{d}{dt}-H^{\times}(t)\right]G_{AB}(t-t')=\delta(t-t')\,I_{A,B} \qquad (2.6')$$

と書けば，$G_{AB}(t-t')$は偏微分方程式論に出て来るいわゆるグリーン函数がみたす方程式に類似した方程式の解になつていることがわかる。"グリーン函数"という名前は，その函数がもつ物理的ないみから応用数学に用いられるグリーンの函数と本質的に同じ性質のものという意味でつけられたものである。(2.6)の右辺の第二項からは新しいグリーン函数が現われ，そのグリーン函数に対しても同様な方程式がつくれるが，これは又別の新しい，グリーン函数を産み，こうして際限なく方程式の鎖が続くことになる。この無限次元の連立方程式は勿論解けない。これを近似的に解くためには，鎖を何処かで切断して有限の方程式群にする必要がある*。ここでグリーン函数の方法の欠点が現われる。現在のところグリーン函数の方程式を解く系統的な近似法は見つかつていない。

この欠点にも拘わらず，グリーン函数の方法はすぐれた長所を持つている。そのいくつかをあげると

〔1〕 グリーン函数は多体系に対して我々が欲する情報をすべて供給してくれる。

〔2〕 多体系に関して常に現われる非線型無限次元の連立方程式を，self-consistent に線型化するのが普通用いられる近似法であるが，後述する「スペクトル定理」の存在は，グリーン函数法が一番簡単で扱いやすいものにしている。

〔1〕はグリーン函数法が巨視系を取扱うのに一番近道を通るものであることを教え，〔2〕は他の方法に比べて少い労力で同程度の結論が導けることをいみしている。そこで〔1〕については次の節に詳論することにして，

* 無限次元の鎖を有限のものに切断することでは，正しい解答がのぞめない場合がある。この場合鎖全体を適当に近似する必要がおこる。

「スペクトル定理」を説明する。

スペクトル定理

グリーン函数

$$G_{AB}(t-t')=\langle\langle A(t):B(t')\rangle\rangle,\quad G_{AB}(t-t')=\langle\langle B(t):A(t')\rangle\rangle$$

に結びついた重要な量は A と B の相関函数

$$F_{AB}(t-t')\equiv\langle A(t)B(t')\rangle$$
および　　(2.7)
$$F_{BA}(t-t')\equiv\langle B(t')A(t)\rangle$$

である。次節で示されるように，平衡状態（t によらない状態）に関して我我が必要な量は普通相関函数で表わされる。相関函数に対してもグリーン函数と同様の運動方程式を作ることができるが，グリーン函数と異なつて，方程式とは別に初期条件，境界条件を課す必要があり，この点グリーン函数の方が解くのに便利であるかだからグリーン函数と相関函数を結びつける関係があるとよいが，スペクトル定理がその関係を与えてくれる。まづTraceの性質を用いて

$$\begin{aligned}\langle A(t)B(o)\rangle&=\frac{1}{Q}\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\mathrm{H}}e^{it\mathrm{H}/\hbar}Ae^{-it\mathrm{H}/\hbar}B\right]\\&=\frac{1}{Q}\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\mathrm{H}}e^{\beta\mathrm{H}-it\mathrm{H}/\hbar}Be^{it\mathrm{H}/\hbar-\beta\mathrm{H}}A\right]\\&=\langle B(o)A(t+i\hbar\beta)\rangle\end{aligned}$$

即ち　$$F_{AB}(t)=F_{BA}(t+i\hbar\beta)\qquad(2.8)$$

が証明される。今 $F_{BA}(t-t')$ のスペクトル分解を

$$F_{BA}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}J_{AB}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}\frac{d\omega}{2\pi}\qquad(2.9)$$

で与えると，(2.8) によつて

$$F_{\mathrm{AB}}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{\mathrm{AB}}(\omega)\, e^{\beta\hbar\omega} e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} \tag{2.10}$$

となる。ところが定義によつて，グリーン函数は$F_{\mathrm{AB}}(t-t')$と$F_{\mathrm{BA}}(t-t')$の一次結合で表わされるから，グリーン函数のスペクトルとF_{AB}，F_{BA}のスペクトルとの間に関係がある。例えば

$$G^{r}_{\mathrm{AB}}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G^{r}_{\mathrm{AB}}(E)\, e^{-iE(t-t')} \frac{dE}{2\pi} \tag{2.11}$$

とすると（2.4）の定義に（2.9）（2.10）を用いることにより直ちに

$$G^{r}_{\mathrm{AB}}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J_{\mathrm{AB}}(\omega)(e^{\beta\hbar\omega}-\eta)}{\hbar(E-\omega+i\varepsilon)}\, d\omega \tag{2.12}$$

$$(\varepsilon \to 0^{+})$$

が得られる。全く同様にadvanced に対しては

$$G^{a}_{\mathrm{AB}}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J_{\mathrm{AB}}(\omega)(e^{\beta\hbar\omega}-\eta)}{\hbar(E-\omega-i\varepsilon)}\, d\omega \tag{2.13}$$

$$(\varepsilon \to 0^{+})$$

ここでEを複素数に拡張し$G^{r}_{\mathrm{AB}}(E)$と$G^{a}_{\mathrm{AB}}(E)$を次で定義される一つの解析函数の二つの分枝函数と見なすのが便利である。

$$\begin{aligned} G_{\mathrm{AB}}(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J_{\mathrm{AB}}(\omega)(e^{\beta\hbar\omega}-\eta)}{\hbar(E-\omega)} \frac{d\omega}{2\pi} \\ &= \begin{cases} G^{r}_{\mathrm{AB}}(E) & \mathrm{Im}\,E>0 \\ G^{a}_{\mathrm{AB}}(E) & \mathrm{Im}\,E<0 \end{cases} \end{aligned} \tag{2.14}$$

この見地では$G_{\mathrm{AB}}(E)$はEの複素平面の実軸上で不連続になり，よく知られた公式

$$\frac{1}{E-\omega\pm i\varepsilon}=P\,\frac{1}{E-\omega}\mp i\pi\delta(E-\omega) \tag{2.15}$$

を用いて実軸上の函数値のとびが

$$G_{AB}(\omega+i\varepsilon)-G_{AB}(\omega-i\varepsilon)=-i\frac{(e^{\beta\hbar\omega}-\eta)}{\hbar}J_{AB}(\omega) \tag{2.16}$$

で与えられることを示すことができる。これは相関函数のスペクトル $J_{AB}(\omega)$ とグリーン函数を結びつける重要な結果で，（2.16）を（2. 7）に入れると

$$F_{BA}(t-t')=\langle B(t')A(t)\rangle=i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{G_{AB}(\omega+i\varepsilon)-G_{AB}(\omega-i\varepsilon)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}\hbar e^{-i\omega(t-t')}\frac{d\omega}{2\pi}$$

$$=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\hbar\,\mathrm{Im}\,[G_{AB}(\omega)]}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}e^{-i\omega(t-t')}\frac{d\omega}{2\pi} \tag{2.17}$$

となる。先に〔2〕で述べたことをもう一度（2.17）を参照してくりかえすと，一般にグリーン函数は（2.6）又は（2.6′）の形の方程式をみたすが，（2.6′）の $I_{A,B}$ は同時刻の相関函数で与えられる量であるので，適当な線形化を行うと方程式の組は種々の相関函数を係数とする代数方程式に帰着される。それを解くとグリーン函数のスペクトル函数は相関函数の汎函数で表わされ，スペクトル公式（2.17）を用いると，相関函数をself-consistentにきめる汎函数方程式が導かれて，一応問題は形式的に閉じた形でとけることになる。

グリーン函数の解析性，対称性，選択則

1° （2.11）によって

$$G^r(E)=\int_{-\infty}^{\infty}G^r(t)e^{iEt}dt=\int_{0}^{\infty}G^r(t)e^{iEt}dt$$

であるから，$E=\mathrm{Re}(E)+i\,\mathrm{Im}[E]\equiv\alpha+i\gamma$ とおくと

$$G^{r}(E) = \int_{0}^{\infty} G^{r}(t)\, e^{-i\alpha t - \gamma t} dt$$

故に，$r>0$ならばこの積分は収束する。すなわち，$G^{r}(E)$ は $\mathrm{Im}(E)>0$ に対して正則である。全く同様な議論で$G^{a}(E)$ は $\mathrm{Im}(E)<0$ に対して正則であることが示される。

故に

$$G(E) = \begin{cases} G^{r}(E) & \mathrm{Im}[E]>0 \\ G^{a}(E) & \mathrm{Im}[E]<0 \end{cases}$$

は実軸を除いていたる所正則である。いいかえると$G(E)$ が特異点をもつとすればそれは実軸上にあることになる。

2° 対称性

グリーン函数の定義（2.4）から直ちに言えることは

$$G^{r}_{AB}(t-t') = \eta\ G^{a}_{BA}(t'-t)$$

$$G^{c}_{AB}(t-t') = \eta\ G^{c}_{BA}(t'-t)$$

である。故にこれらのスペクトル函数を$G^{r}_{AB}(E)$，$G^{a}_{AB}(E)$，$G^{c}_{AB}(E)$ とすると

$$\begin{aligned} G^{r}_{AB}(E) &= \eta\ G^{a}_{BA}(-E) \\ G^{c}_{AB}(E) &= \eta\ G^{c}_{BA}(-E) \end{aligned} \tag{2.18}$$

が得られる。もしも$G^{r}_{AB}(E)$と $G^{a}_{AB}(E)$を一つの複素函数$G_{AB}(E)$の分枝と見なすとすべてのグリーン函数について一般に

$$G_{AB}(E) = \eta\ G_{BA}(-E) \tag{2.19}$$

が成立することがわかる。

3° 選択則

系が保存則，例えば粒子数の保存則とか，運動量保存則をもつとき，その性質はグリーン函数に反映されて，グリーン函数の成分に関する選択則とな

つて現われる。例としてFermi 粒子保存則とグリーン函数の関係を述べる。$a_{k\sigma}$，$a^+_{k\sigma}$をそれぞれ運動量k，スピンσのFermi 粒子の消滅演算子，創生演算子とすると，粒子の総数は

$$N=\sum_{k\sigma} a^*_{k\sigma}a_{k\sigma} \tag{2.20}$$

で与えられ，これが保存することは，系のハミルトハアンHとNが可換であること。

$$[H,N]=0 \tag{2.21}$$

で表現される。演算子$U=e^{i\varphi N}$で誘起されるウニテール変換$U^+\cdots\cdots U$に対して当然Hは不変であるから

$$H=U^+HU \tag{2.22}$$

一方容易にたしかめられるように，$a_{k\sigma}$，$a^+_{k\sigma}$ はこの変換で

$$a_{k\sigma}\to U^+a_{k\sigma}U=e^{i\varphi}a_{k\sigma}\quad a^+_{k\sigma}\to U^+a^+_{k\sigma}U=e^{-i\varphi}a^+_{k\sigma} \tag{2.23}$$

にかわる。今

$$<\cdots\cdots a^+_{k\sigma}(t)\ \cdots\cdots a_{k'\sigma'}(t')\cdots\cdots> \tag{2.24}$$

のようなa a^+ の積の平均値を考えると（2.22）（2.23）に注意して

$$\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\cdots a^+_{k\sigma}(t)\cdots a_{k'\sigma'}(t')\cdots\right]=\mathrm{Tr}\left[U^+e^{-\beta H}U\cdots a^+_{k\sigma}(t)\cdots a_{k'\sigma'}(t')\cdots\right]$$

$$=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}U\cdots a^+_{k\sigma}(t)\ \cdots a_{k'\sigma'}(t')\cdots U^+\right]\qquad (\text{Trace の性質})$$

$$=e^{-i\varphi n}\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\cdots a^+_{k\sigma}(t)\cdots a_{k'\sigma'}(t')\cdots\right]\qquad (2.23)$$

但しn=（ <…>の中のaの数）－（ a^+ の数）である。結局

$$(1-e^{-in\varphi})<\cdots a^+_{k\sigma}(t)\ \cdots a_{k'\sigma'}(t')\cdots>=0$$

従って$n=0$でない限り<…>　0である。グリーン函数は結局（2.24）の形の相関函数の二次結合であるから，グリーン函数の中にあらわれる消滅

演算子の数と創生演算子の数は等しくなければならない。例えば

$$< a_k^+ a_{k'}^+ > \equiv 0 \ , \ < a_k a_{k'} > \equiv 0 \tag{2.25}$$

でなければならない。同様な議論を運動量

$$\vec{P} = \sum_{k\sigma} \vec{k}\ a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \tag{2.26}$$

に対して適用すると，任意のベクトル $\vec{\xi}$ を用いた $U = e^{ip\xi}$ で誘起されるウニラール変換に対して H が不変であるとすると

$$U^+ H U = H \ , \ U^+ a_{k\sigma} U = e^{ik\xi} a_{k\sigma} \ , \ U^+ a_{k\sigma}^+ U = e^{-ik\xi} \tag{2.27}$$

である。故に前と全く同様に

$$< \cdots a_{-kj\sigma j}(t_j) \cdots a_{ks\sigma s}(t_s) \cdots >$$

$$= e^{i(k_1 + k_2 + \cdots k_n) \cdot \xi} < \cdots a_{-kj\sigma j}^+(t_1) \cdots a_{ks\sigma s}(ts) \cdots >$$

となつて $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \cdots + \vec{k}_n = 0$ でない限りグリーン函数は恒等的に消える。例えば

$$< a_{k\sigma}^+ a_{k'\sigma'}^+ > , \ < a_{k\sigma} a_{k'\sigma'} > , \ < a_{k\sigma}^+ a_{k'\sigma'} > , \ < a_{k\sigma} a_{k'\sigma'}^+ >$$

の中で0でないのは

$$< a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} > , \ < a_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ >$$

だけである。