講義ノート

二時間グリーン函数の理論とその応用(II)

松　原　武　生（京大理）

§3　巨視系に対する information とグリーン函数の関係

多体系に対してわれわれが持ち得る情報がグリーン函数を用いてどのように表わせるかをこの節で議論する。平衡状態では時間に無関係な平均値が対象になるから，グリーン函数との結びつきはやゝ間接的であるが，非平衡状態ではグリーン函数が主役を演ずる。種々の系を一般的に扱うわけにいかないから，第二量子化された波動函数 $\phi^{+}(\boldsymbol{r},t)$，$\phi(\boldsymbol{r},t)$ で記述されるフエルミ粒子（$\eta=-1$）又はボーズ粒子（$\eta=1$）の集りを考え，粒子数を

$$N=\int\phi^{+}(\boldsymbol{r}t)\phi(\boldsymbol{r}t)\,d\boldsymbol{r} \tag{3,1}$$

ハミルトニアンを

$$H=\int d\boldsymbol{r}\phi^{+}(\boldsymbol{r}t)\left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\Delta\right)\phi(\boldsymbol{r}t)+\frac{1}{2}\iint d\boldsymbol{r}\,d\boldsymbol{r}'\phi^{+}(\boldsymbol{r}t)\phi^{+}(\boldsymbol{r}'t)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi(\boldsymbol{r}'t)\phi(\boldsymbol{r}t) \tag{3,2}$$

とする。

(i)　粒子密度

粒子密度の平均値は

$$\langle n(\boldsymbol{r}t)\rangle=\langle\phi^{+}(\boldsymbol{r}t)\phi(\boldsymbol{r}t)\rangle=\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\langle a_{k\sigma}^{+}a_{k\sigma}\rangle \tag{3,3}$$

で与えられる。スペクトル定理によつて

$$\langle a^{+}_{k\sigma}(t')a_{k\sigma}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J_{k\sigma}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} \qquad (3, 4)$$

で定義される $J_{k\sigma}(\omega)$ と，（3，4）に関連したグリーン函数とは

$$G_{k\sigma}(E) = \langle\langle a_{k\sigma}; a^{+}_{k\sigma}\rangle\rangle_{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J_{k\sigma}(\omega)(e^{\beta\hbar\omega}-\eta)}{\hbar(E-\omega)} \frac{d\omega}{2\pi} \qquad (3, 5)$$

の関係で結ばれており，従つて

$$\langle a^{+}_{k\sigma}(t')a_{k\sigma}(t)\rangle = i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{k\sigma}(\omega+i\varepsilon)-G_{k\sigma}(\omega-i\varepsilon)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta} \hbar e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} \qquad (3, 6)$$

となる。そこでスペクトル密度を

$$\frac{\hbar}{2\pi} i\left[G_{k\sigma}(\omega+i\varepsilon)-G_{k\sigma}(\omega i\varepsilon)\right]_{\varepsilon\to 0^+} = -\frac{\hbar}{\pi} \mathrm{Im}\left[G_{k\sigma}(\omega)\right] \equiv A_{k\sigma}(\omega) \qquad (3, 7)$$

で定義すると，（3，6）で $t=t'$ とおいて結局

$$\langle n(\mathbf{r}t)\rangle = \frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta} d\omega \qquad (3, 8)$$

が得られる。　更に状態密度

$$D(\omega) = \sum_{k\sigma} A_{k\sigma}(\omega) \qquad (3, 9)$$

を用いると（3，8）は次のようにも書くことができる，

$$\langle n(\mathbf{r}t)\rangle = \frac{1}{V}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{D(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta} d\omega \qquad (3, 10)$$

$A_{k\sigma}(\omega)$ は次のような性質を持つている（証明略）：

$$\left.\begin{array}{ll} \text{(a)} & A_{k\sigma}(\omega) \geqq 0 \\ \text{(b)} & \int_{-\infty}^{\infty} A_{k\sigma}(\omega)d\omega = 1 \\ \text{(c)} & \text{自由粒子に対して } A_{k\sigma}(\omega) = \delta\left(\omega-\frac{(\varepsilon_k-\mu)}{\hbar}\right),\ \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{array}\right\} \qquad (3, 11)$$

これから $A_{k\sigma}(\omega)$ が ω の函数としてどのような振舞をするか大体見当がつく。

粒子が相互作用していても$A_{k\sigma}(\omega)$は$\omega\sim\frac{\varepsilon_k-\mu}{\hbar}$附近に集中した分布をもつと考えてよいであろう。

(ii) 系のエネルギー

(3,2)で与えられるHの平均値を求めればよいのであるが，粒子間の二体力による位置エネルギーの部分は運動方程式を用いて少し変形するのが便利である。$\mathrm{H}=H-\mu N$ として$\phi(\boldsymbol{r}t)$に対する運動方程式をつくると

$$i\hbar\frac{\partial\phi(\boldsymbol{r}t)}{\partial t}=[\phi(\boldsymbol{r}t),\mathrm{H}]=(-\frac{\hbar^2\triangle}{2m}-\mu)\phi(\boldsymbol{r}t)+\int d\boldsymbol{r}'\,v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi^+(\boldsymbol{r}'t)\times\phi(\boldsymbol{r}'t)\phi(\boldsymbol{r}t)$$

これに左側から$\phi^+(\boldsymbol{r}t)$をかけることによって

$$\frac{1}{2}\iint d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\,\phi^+(\boldsymbol{r}t)\phi^+(\boldsymbol{r}'t)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi(\boldsymbol{r}'t)\phi(\boldsymbol{r}t)=\frac{1}{2}\int\left\{i\hbar\phi^+(\boldsymbol{r}t)\frac{\partial\phi(\boldsymbol{r}t)}{\partial t}+\phi^+(\boldsymbol{r}t)(\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+\mu)\phi(\boldsymbol{r}t)\right\}d\boldsymbol{r}$$

が得られる。これを(3,2)に入れて平均をとると

$$\langle H\rangle=\frac{1}{2}\int\left\{i\hbar\left\langle\phi^+(\boldsymbol{r}t)\frac{\partial\phi(\boldsymbol{r}t)}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\phi^+(\boldsymbol{r}t)(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+\mu)\phi(\boldsymbol{r}t)\right\rangle\right\}d\boldsymbol{r}\tag{3,12}$$

となる。右辺をグリーン函数のスペクトルで表わすには次のようにすればよい。

$$\begin{aligned}i\hbar\left\langle\phi^+(\boldsymbol{r}t)\frac{\partial\phi(\boldsymbol{r}t)}{\partial t}\right\rangle&=\lim_{t'\to t}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\phi^+(\boldsymbol{r}t')\phi(\boldsymbol{r}t)\rangle\\&=\lim_{t'\to t}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\langle a^+_{k\sigma}(t')a_{k\sigma}(t)\rangle\\&=\lim_{t'\to t}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}e^{-i\omega(t-t')}d\omega\\&=\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\hbar\omega A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}d\omega\end{aligned}\tag{3,13}$$

同様に

$$\langle\phi^+(rt)(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+\mu)\phi(rt)\rangle=\lim_{r'\to r}(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+\mu)\langle\phi^+(r'\ t)\phi(rt)\rangle$$

$$=\lim_{r'\to r}(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+\mu)\frac{1}{V}\sum_{k\sigma} e^{ik(r-r')}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,\frac{A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}$$

$$=\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\mu)/(e^{\beta\hbar\omega}-\eta)\cdot A_{h\sigma}(\omega)\,d\omega \qquad (3,14)$$

故に(3,12)(3,13)(3,14)を組合わせて

$$\langle H\rangle=\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}\{\hbar\omega+\mu+\frac{\hbar^2k^2}{2m}\}\frac{A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}\,d\omega$$

あるいは $\hbar\omega+\mu=E$, $A_{k\sigma}(\omega)d\omega\equiv A_{k\sigma}(E)dE$ とおいて

$$\langle H\rangle=\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}(E+\varepsilon_k)\frac{A_{k\sigma}(E)}{e^{\beta(E-\mu)}-\eta}\,dE \qquad (3,15)$$

が得られる。かくして系のエネルギーの平均値も $A_{k\sigma}(\omega)$ だけできまることがわかつた。

(iii) 自由エネルギー

自由エネルギーをグリーン函数で表わすことは一般に難しい。エントロピーの表式を得ることが困難だからである。ここでは時々成功する二種の方法を述べる。

結合常数で微分する方法　ハミルトニアン(3,2)に結合常数λを陽に含ませて

$$H=H_0+\lambda\Phi$$

$$\Phi=\frac{1}{2}\iint dr\,dr'\,\phi^+(rt)\phi^+(r'\ t)v(r-r')\phi(r'\ t)\phi(rt) \qquad (3,16)$$

と書くと，大きい状態和は

$$Q(\lambda)=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H_0+\lambda\Phi-\mu N)}\right]$$

十一 外

となる。この対数をλで微分するとH_oとΦが可換でなくても

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\ln Q(\lambda)=-\beta\frac{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H_o+\lambda\Phi-\mu N)}\Phi\right]}{Q(\lambda)}\equiv-\beta\langle\Phi\rangle_\lambda$$

が導かれる。これを再びλで0から1まで積分すると

$$\ln\frac{Q(1)}{Q(0)}=-\beta\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\langle\lambda\Phi_\lambda\rangle \qquad (3,17)$$

故に$\langle\lambda\Phi\rangle_\lambda$が$\lambda$の函数として陽に求まれば自由エネルギー$-\frac{1}{\beta}\ln Q(1)$をきめることができる。結合常数が$\lambda$であるときのスペクトル密度(3,7)を$A_{k\sigma}(\omega,\lambda)$と書くと(ii)と同様にして

$$\langle\lambda\Phi\rangle\lambda=\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}(\hbar\omega+\mu-\varepsilon_k)\frac{A_{k\sigma}(\omega,\lambda)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}d\omega \qquad (3,18)$$

が示される。

<u>μで微分する方法</u>　よく知られているように，大きい状態和と系の圧力Pとは

$$Q=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H-\mu N)}\right]=e^{\beta PV}$$

で結ばれている。Pを温度$1/\beta$，体積Vを一定に保つてμで微分すると

$$\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Q=\beta V\left(\frac{\partial P}{\partial\mu}\right)_{\beta,V}=\beta\frac{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H-\mu N)}N\right]}{Q}=\beta\langle N\rangle$$

$$\therefore\left(\frac{\partial P}{\partial\mu}\right)_{\beta,V}=\frac{\langle N\rangle}{V}\equiv n \qquad (3,19)$$

となる。ここで$n\to0$，$P\to0$の極限で$\mu\to-\infty$に注意して(3,19)を再びμで積分する：

$$\begin{aligned}P(\beta,\mu)&=\int_{-\infty}^{\mu}d\mu'\,n(\beta,\mu')\\&=\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\int_{-\infty}^{\mu}d\mu'\frac{A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}\end{aligned} \qquad (3,20)$$

この方法は勿論自由粒子の場合正しい自由エネルギーを与える。自由粒子の場合(3，11) の (c) によつて(3,20)は

$$P(\beta,\mu)=\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\mu}d\mu'\ \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-\eta}=\mp\frac{1}{\beta}\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\ln\{1-\eta e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\} \tag{3,21}$$

となるからである。今

$$\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}=\frac{\eta}{\beta\hbar}\frac{\partial}{\partial\omega}\ \ln(1-\eta e^{-\beta\hbar\omega})$$

であることに注意すると，$|\omega|\to\infty$ で $A_{k\sigma}(\omega)\to 0$ の性質と部分積分を用いて

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\ \frac{A_{k\sigma}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-\eta}=-\frac{\eta}{\beta\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\ \ln(1-\eta e^{-\beta\hbar\omega})\left\{\frac{\partial A_{k\sigma}(\omega)}{\partial\omega}\right\}$$

これを(3,20)の P の表式に持込むと

$$PV=-\frac{\eta}{\beta\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\ \sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\mu}d\mu'\ \ \ln(1-\eta e^{-\beta\hbar\omega})\left\{\frac{\partial A_{k\sigma}(\omega\ \mu')}{\partial\omega}\right\}$$

故に

$$\mathcal{Q}(\omega,\mu)\equiv\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}d\mu'\ \left\{\frac{\partial A_{k\sigma}(\omega,\mu')}{\hbar\partial\omega}\right\} \tag{3,22}$$

を定義すれば

$$PV=-\frac{\eta}{\beta}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\ \ln(1-\eta e^{-\beta\hbar\omega})\mathcal{Q}(\omega,\mu) \tag{3,23}$$

となつて，自由エネルギーは恰も状態密度が$\mathcal{Q}(\omega,\mu)$で与えられる自由粒子の集りに対するものと同形になる。(3,9)の状態密度$D(\omega,\mu)$と$\mathcal{Q}$とは

$$\mathcal{Q}(\omega,\mu)=\int_{-\infty}^{\mu}d\mu'\ \frac{\partial D(\omega,\mu')}{\hbar\partial\omega} \tag{3,24}$$

で関係づけられているが，もしも$D(\omega\mu)$が$\hbar\omega-\mu$のみの函数(自由粒子の

場合はそうである）ならば$\mathcal{Q}(\omega,\mu)$と$D(\omega,\mu)$は同じものになる。
以上に見た如く平衡状態における多体系の性質はスペクル密度$A_{k\sigma}(\omega,\mu)$だけできまり，グリーン函数でいえば一体のグリーン函数さへわかればよろしい。但しこのきわだつた性質は粒子間の相互作用が二体力であることに基づいているのであつて，もし三体力がはたらく時は一般に二体のグリーン函数の知識も要求される。

(iv) 時間変化する外場に対するレスポンス

非可逆過程の統計力学は外場に関して線型近似する範囲で，厳密且一般的な定式化がKubo によつて与えられている。Kubo 理論では一般化された緩和函数又は応答函数が現われるが，これらはグリーン函数と密接に関係した量であることが示される。

多体系の平均的な振舞を記述するに充分な一組の巨視的な観測量A_1 A_2 $\cdots\cdots A_m$ を用意し，これらに共軛な一般化された外力を$F_1F_2\cdots F_n$ とする。$\{A_j\}$は演算子，$\{F_j\}$はc－数の組と見なす。共軛といういみは$\{F_j\}$が0でないときに系に余分に加わるエネルギーが

$$H_{ex}=-\sum_{j=1}^{n} A_j F_j \tag{3,25}$$

で与えられるということである。 $t=-\infty$ から$t=0$までFを一定に保ち，$t>0$に対して$F_j=0$ としたとき$t>0$のA_j の平均値を

$$\langle A_j(t)\rangle=\langle A_j\rangle_0+\sum_{k=1}^{n}\Phi_{jk}(t)F_k \tag{3,26}$$

と書いた時，$\Phi_{jk}(t)$ を一般化した緩和函数の行列と呼ぶ，Kubo によれば$\Phi_{jk}(t)$ は

$$\Phi_{jk}(t)=\int_0^{\beta} d\lambda\ \langle A_k(-i\hbar\lambda)\ A_j(t)\rangle$$

$$A_j(t) \equiv e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \qquad A_k(i\hbar\lambda) = e^{\lambda H} A_k e^{-\lambda H} \tag{3,27}$$

で与えられる。場合によつてはパルス的励起に対するレスポンスの方が便利なことがある。k 第目の外力 F_k が 1 の強さで t_0 と $t_0 + \triangle t$ の間にはたらいたときの j 番目の観測量 A_j の平均値を

$$\langle A_j(t-t_0)\rangle = \begin{cases} 0 & t<t_0 \\ \phi_{jk}(t-t_0)\triangle t & t>t_0 \end{cases} \tag{3,28}$$

と書いたとき，$\phi_{jk}(t)$ を一般化した応答函数の行列と呼ぶ，その定義から

$$\triangle t\,\phi_{jk}(t-t_0) = \Phi_{jk}(t-t_0-\triangle t) - \Phi_{jk}(t-t_0)$$

$$\phi_{jk}(t) = -\frac{d\Phi_{jk}(t)}{dt} \tag{3,29}$$

であることは明かである。線型近似の範囲では，一般の時間変化する外場 $F_k(t)$ に対するレスポンスは重畳原理によつてパルスの重ね合わせとして

$$\langle A_j(t)\rangle = \sum_k \int_{-\infty}^{t} \phi_{jk}(t-\tau) F_\kappa(\tau)\,d\tau$$

$$= \sum_k \int_0^{\infty} \phi_{jk}(s) F_k(t-s)\,ds \tag{3,30}$$

となる。特に外力が角振動数 ω で週期的に変化するとき

$$F_k(t) = e^{\varepsilon t + i\omega t} F_k \qquad (\varepsilon \to 0^+)$$

$$\langle A_j(t)\rangle = \sum_k \chi_{jk}(\omega) F_k e^{\varepsilon t + i\omega t} \tag{3,31}$$

$$\chi_{jk}(\omega) = \phi_{jk}(\omega) = \Phi_{jk}(0) - i\omega\Phi_{jk}(\omega)$$

の形に書ける。但し $\phi_{jk}(\omega)$, $\Phi_{jk}(\omega)$ は $\phi_{jk}(t)$, $\Phi_{jk}(t)$ の cosine 変

換である。

$$\phi_{jk}(\omega)=\int_0^\infty \phi_{jk}(t)e^{-\varepsilon t-i\omega t}dt,$$

$$\Phi_{jk}(\omega)=\int_0^\infty \Phi_{jk}(t)e^{-\varepsilon t-i\omega t}dt \tag{3,32}$$

さて，グリーン函数との関係を調べるのであるが，それには唯一つの外力 $F_k(t)$ が作用するときの A_j のレスポンスを外力による摂動

$$H'(t)=-A_k e^{\varepsilon t}F_k(t) \tag{3,33}$$

について一次まで計算する。時間的に

$$i\hbar\frac{d\rho(t)}{dt}=\left[H+H'(t),\rho(t)\right] \tag{3,34}$$

に従つて変化する密度行列 $\rho(t)$ を用いると

$$\langle A_j(t)\rangle=\mathrm{Tr}\left[\rho(t)A_j\right] \tag{3,35}$$

$t=-\infty$ で系は熱平衡にあつたとして初期条件

$$\rho(t)]_{t=-\infty}=\frac{1}{Q}e^{-\beta H}=\rho$$

をみたす (3,34) の解は H' について一次の近似で

$$\rho(t)=\rho+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}e^{iH(\tau-t)/\hbar}\left[H'(\tau),\rho\right]e^{-iH(\tau-t)/\hbar}d\tau$$

で与えられることは容易にたしかめられる。これを (3,35) に代入すると (3,33) によつて

$$\langle A_j(t)\rangle=\langle A_j\rangle+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\langle[A_j(t)A_k(\tau)]_-\rangle F_k(\tau)e^{\varepsilon\tau}d\tau$$

$$=\langle A_j\rangle+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\theta(t-\tau)\langle[A_j(t)A_k(\tau)]_-\rangle F_k(\tau)d\tau \qquad \theta(t)=\begin{cases}1 & t>0\\ 0 & t<0\end{cases}$$

$$\equiv\langle A_j\rangle-\int_{-\infty}^{\infty}G^r_{jk}(t-\tau)F_k(\tau)d\tau \tag{3,36}$$

G^rは勿論' retarded ' グリーン函数である。この結果を先に導いた(3,30)と比較すると明かなように

$$G^r_{jk}(t)=\begin{cases}0 & t<0\\ -\phi_{jk}(t) & t>0\end{cases} \tag{3,37}$$

である。これからグリーン函数 $G^r_{jk}(t)=\langle\langle A_j(t):A_k\rangle\rangle^r$ の物理的意味がはっきりする。それは $t=0$ において A_k に共轭な外力を1の強さでパルス的に加えたときの，A_j の平均値に現われる時間変化を記述するものである。 又(3,27)(3,29)(3,37)を組合せると $t>0$ に対して

$$G^r_{jk}(t)=\int_0^{\beta}d\lambda\langle A_k(-i\hbar\lambda)\dot{A}_j(t)\rangle$$
$$=-\int_0^{\beta}d\lambda\langle\dot{A}_k(-i\hbar\lambda)A_j(t)\rangle \tag{3,38}$$

が成立つ。この関係はグリーン函数の定義から出発して直接証明することも出来る。

(V) 例

1° 磁場に対する レスポンス

外磁場ベクトルを$\boldsymbol{H}(t)$，系の全磁気能率を$\boldsymbol{M}$として

$$H'(t)=-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H}(t)$$

磁場のν成分$H_\nu(t)$だけ加えて，μ方向の磁化を観測するとき

$$\langle M_\mu(t)\rangle=-\int_{-\infty}^{\infty}G^r_{\mu\nu}(t-t')H_\nu(t')dt'$$

$$G^r_{\mu\nu}(t-t') = \langle\langle M_\mu(t):M_\nu(t')\rangle\rangle^r \quad -i\theta(t-t')\langle[M_\mu(t),M_\nu(t')]_-\rangle$$

(3,39)

となる。

2° 電場に対する　レスポンス

外部電場を$\vec{E}(t)$，系の全双極能率を$\vec{P}$とすれば

$$H'(t) = -\vec{P}\cdot\vec{E}(t)$$

絶縁体に電場のν成分$E_\nu(t)$を加へてμ方向の電気分極を観測すると

$$\langle P_\mu(t)\rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} G^r_{\mu\nu}(t-t')E_\nu(t')dt' \qquad (3,40)$$

$$G^r_{\mu\nu}(t-t') = \langle\langle P_\mu(t):P_\nu(t')\rangle\rangle^r \equiv -i\theta(t-t')\langle[P_\mu(t)P_\nu(t')]_-\rangle$$

導体に電場のν成分を加へてμ方向の電流j_μを観測すると

$$\langle j_\mu(t)\rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} G^r_{\mu\nu}(t-t')E_\nu(t')dt'$$

$$G^r_{\mu\nu}(t-t') = \langle\langle j_\mu(t):P_\nu(t')\rangle\rangle^r \qquad (3,41)$$

(3,38)を適用すると　$\dot{P}_\nu \equiv j_\nu$ に注意して

$$\langle\langle j_\mu(t):P_\nu(t')\rangle\rangle = -\int_0^\beta d\lambda\langle\dot{P}_\nu(t'-i\hbar\lambda)j_\mu(t')\rangle$$

$$= -\int_0^\beta d\lambda\langle j_\nu(-i\hbar\lambda)j_\mu(t-t')\rangle \qquad t>0$$

$$\langle j_\mu(t)\rangle = \int_{-\infty}^{t} dt' \int_0^\beta d\lambda\langle j_\nu(-i\hbar\lambda)j_\mu(t-t')\rangle E_\nu(t')dt'$$

$$= \int_0^\infty ds\int_0^\beta d\lambda\langle j_\nu(-i\hbar\lambda)j_\mu(s)\rangle E_\nu(t-s) \qquad (3,42)$$

これはよく知られた電気伝導度を与えるKuboの公式である。

3° $\boldsymbol{r}_1$ における粒子密度 $\rho(\boldsymbol{r}_1)$ に比例した攪乱

$$H'(t) = \rho(\boldsymbol{r}_1)F(t)$$

が系に与えなれたときの $\boldsymbol{r}$ 点の粒子密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ を観測すると

$$\langle\rho(\boldsymbol{r}t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle P(\boldsymbol{r}t):P(\boldsymbol{r}_1 t')\rangle\rangle^r F(t')dt' \qquad (3,43)$$

これは $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}$ の二点における異る時刻の粒子密度の相関によりきまり，Born 近似で液体による中性子線廻折強度を扱うときなどに使われる。

§4 調和振子の系

グリーン函数の方法になれ，他の方法との関係を理解するのに一番よいのは，厳密に解きうる多体系を考えることである。そのような系の唯一の例は結合調和振子系であろう。

(i) 基準振動とグリーン函数

まず簡単のため唯一種の振子を考える：

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2 \qquad [q,p]_- = i\hbar \qquad (4,1)$$

この系の性質をわれわれは知りつくしているけれど，それをわざわざグリーン函数を用いて調べようというわけである。普通は(4,1)を次の変換で'対角化'することからはじめられる：

$$P = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}(a^* - a) \qquad q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(a^* + a) \qquad [a, a^*] = 1 \qquad (4,2)$$

(4,2)により，ハミルトニアン H は

$$H = \hbar\omega_0\left(a^*a + \frac{1}{2}\right) \qquad (4,3)$$

となり，新しい演算子 a, a^* に対する運動方程式は簡単に

$$i\frac{da}{dt} = \omega_0 a \quad , \quad i\frac{da^*}{dt} = -\omega_0 a^* \qquad (4,4)$$

で与えられる。Hと$a^* a$は可換であるから　2で述べた選択則により，考え得るグリーン函数は今の場合$\langle\langle a;a^*\rangle\rangle$と$\langle\langle a^*, a\rangle\rangle$だけである。又対称性（2,19）によつて後者は前者のフーリエ成分で$E\to -E$としたものに過ぎないから結局 $G(t-t') = \langle\langle a(t);a^*(t')\rangle\rangle$ 或いはそのフーリエ成分$G(E)$だけで充分である。$G(E)$に対する方程式は（2,6）と（4,4）から直ちに求められる。：

$$EG(E) = \frac{1}{\hbar} + \omega_0 G(E) \qquad\qquad G(E) = \frac{1}{\hbar}\,\frac{1}{E-\omega_0} \qquad (4,5)$$

前節で定義したスペクトル密度（3,7）は今の場合

$$A(\omega) = -\frac{\hbar}{\pi}\mathrm{Im}\,[G(\omega)] = \delta(\omega-\omega_0) \qquad (4,6)$$

となり，又スペクトル定理は

$$\langle a^* a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\,d\omega = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0}-1} \qquad (4,7)$$

に帰する。従つて例えばエネルギーの平均値$\langle H\rangle$は

$$\langle H\rangle = \hbar\omega_0\left\{\langle a^* a\rangle + \frac{1}{2}\right\} = \hbar\omega_0\left\{\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0}-1} + \frac{1}{2}\right\} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\coth\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_0\right) \qquad (4,8)$$

で与えられる。ところがもしHを（4,3）のように'対角化'しないで，（4,1）のまま扱えばどうなるか。p, qに対する運動方程式は（4,1）から

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega_0^2\, q \quad , \qquad \frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} \qquad (4,9)$$

p, qを力学変数に選ぶと，特別の選択則がないのでグリーン函数としては

$$\begin{pmatrix} \langle\langle p(t):p(t')\rangle\rangle & \langle\langle p(t):q(t')\rangle\rangle \\ \langle\langle q(t):p(t')\rangle\rangle & \langle\langle q(t):q(t')\rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{pp}(t-t') & G_{pq}(t-t') \\ G_{qp}(t-t') & G_{qq}(t-t') \end{pmatrix}$$

の４種を全部考える必要がある。これらに対する運動方程式およびそのフーリエ変換は容易に得られる：

$$i\frac{d}{dt}\ G_{pp}(t-t') = -m\omega_0^2 G_{qp}(t-t') \qquad EG_{pp}(E) = -im\omega_0^2 G_{qp}(E)$$

$$i\frac{d}{dt}\ G_{qp}(t-t') = i+\frac{i}{m}\ G_{pp}(t-t') \qquad EG_{qp}(E) = i+\frac{i}{m}G_{pp}(E)$$

$$i\frac{d}{dt}\ G_{qq}(t-t') = \frac{i}{m}G_{pq}(t-t') \quad \leftrightarrow \quad EG_{qq}(E) = \frac{i}{m}G_{pq}(E)$$

$$i\frac{d}{dt}\ G_{pq}(t-t') = -i-im\omega_0^2 G_{qq}(t-t') \qquad EG_{pq}(E) = -i-im\omega_0^2 G_{qq}(E)$$

(4,10)

これから次の行列が導かれる。

$$\begin{pmatrix} G_{pp}(E) & G_{pq}(E) \\ G_{qp}(E) & G_{qq}(E) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{m\omega_0^2}{E^2-\omega_0^2} & -i\dfrac{E}{E^2-\omega_0^2} \\ \dfrac{iE}{E^2-\omega_0^2} & \dfrac{\frac{1}{m}}{E^2-\omega_0^2} \end{pmatrix} = \frac{1}{E^2-\omega_0^2}\begin{pmatrix} m\omega_0^2 & -iE \\ iE & \frac{1}{m} \end{pmatrix}$$

(4,11)

対称性 $G_{pq}(E) = G_{qp}(-E)$ がみたされていることに注意，$\langle H\rangle$ の計算には $\langle p^2\rangle, \langle q^2\rangle$ がわかればよいから　スペクトル密度としては

$$A_{pp}(\omega) = -\frac{\hbar}{\pi}\mathrm{Im}\,[G_{pp}(\omega)] = \frac{m\hbar\omega_0}{2}\ \{\delta(\omega-\omega_0)-\delta(\omega+\omega_0)\}$$

$$A_{qq}(\omega) = -\frac{\hbar}{\pi}\mathrm{Im}\,[G_{qq}(\omega)] = \frac{\hbar}{2m\omega_0}\ \{\delta(\omega-\omega_0)-\delta(\omega+\omega_0)\} \tag{4,12}$$

だけが必要である。スペクトル定理を利用して先に求めたと同じ

$$\langle H\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{1}{2m}A_{pp}(\omega)+\frac{1}{2}\ m\omega_0^2 A_{qq}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\ d\omega$$

$$=\frac{\hbar\omega_0}{2}\left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0}-1}-\frac{1}{e^{-\beta\hbar\omega_0}-1}\right]=\frac{\hbar\omega_0}{2}\coth\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_0$$

を得る。以上二通りの方法で同じ結果を導いたが，途中の経過からすぐ気づくように行列

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{m\hbar\omega_0}G_{pp}(E) & \frac{1}{\hbar}G_{pq}(E) \\ \frac{1}{\hbar}G_{qp}(E) & \frac{m\omega_0}{\hbar}G_{qq}(E) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{1}{\hbar}\frac{\omega_0}{E^2-\omega_0^2} & -\frac{i}{\hbar}\frac{E}{E^2-\omega_0^2} \\ \frac{i}{\hbar}\frac{E}{E^2-\omega_0^2} & \frac{1}{\hbar}\frac{\omega_0}{E^2-\omega_0^2} \end{pmatrix}$$

を適当なウニテール変換で対角比すると

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\hbar}\frac{1}{E-\omega_0} & 0 \\ 0 & \frac{-1}{\hbar}\frac{1}{E+\omega_0} \end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix} \langle\langle a:a^*\rangle\rangle_E & 0 \\ 0 & \langle\langle a^*:a\rangle\rangle_E \end{pmatrix}$$

となるのである。そして二種の表示で共通なのは E の函数と見たときのグリーン函数の極の位置である。最初の方法では演算子のまま＂対角化＂の操作を先にしてグリーン函数を簡単にしたことになり，第二の方法はグリーン函数の中で＂対角化＂の操作を必要としたがその代り演算は全く初等代数でやられた。何れの方法をとつても結果は勿論同じである。

グリーン函数の方法は調和振子の系に対しては基準振動をきめ，振動数を決定することを初等的にやつてくれるものである。しかし最初から基準振動に分解できておれば，グリーン函数は非常に簡単な標準型とも呼ぶべき形をもつから，可能ならば標準型から出発するのが便利である。

（未　完）