

講義ノート

固体物理 第3回

中 島 貞 夫

§4 Green 関数

多体系における熱力学的ポテンシャル Ω の他に、種々の物理量の平均値を知る必要がある。例えば電子系において、charge density : $e \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r})$, current density : $\sum_{\sigma} \frac{\hbar e}{2mi} \left[\psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial \psi_{\sigma}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \psi_{\sigma}(\vec{r}) \right]$ 等、一般には、一電子型の物理量は

$$\sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) f_{\sigma\sigma'}(\vec{r}, \vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}')$$

の形をしている。

f : c-number coefficient.

これらの物理量の統計平均は、一電子密度行列 $\langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \rangle$ がわかればよい。

2電子型の物理量の場合は、2電子密度行列 $\langle \psi^{\dagger} \psi^{\dagger} \psi \psi \rangle$ が知らればよい。

また物理量の時間的なゆらぎは、異なる時刻の operator の積の平均値より知らされる。

この事を一般化して、Green 関数の概念に到る。

a) 複素時間とスペクトル関数

今、熱平衡系を考え、具体的に電子系の field operator $\psi_{\sigma}(\vec{r})$ のハイゼンベルグ表示は、

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}, t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} H t} \psi_{\sigma}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (4.1)$$

時間的ゆらぎも含めた1電子密度行列を定義する。

$$g^{<}(1, 2) \equiv \langle \psi_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{r}_2, t_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1, t_1) \rangle \quad (4.2)$$

$$g^>(1,2) \equiv \langle \psi(\vec{r}_1, t_1) \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2, t_2) \rangle. \quad (4.3)$$

ここで、 $\beta = \frac{1}{k_B T}$, $\mathcal{H} = H - \mu N$ として、 $\langle \rangle$ は Gibbs の統計平均である。

$$\langle Q \rangle \equiv T_T \{ e^{\beta(Q-\mathcal{H})} Q \}. \quad e^{-\beta Q} = T_T \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}. \quad (4.4)$$

次に $g^{\leq}(1,2)$ は、時間については差の函数、すなわち $(t_1 - t_2)$ の函数である事が示せる。

$$\begin{aligned} g^>(1,2) &= T_T \{ e^{\beta(Q-\mathcal{H})} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t_1} \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t_1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t_2} \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t_2} \} \\ &= T_T \{ e^{\beta(Q-\mathcal{H})} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t_1 - t_2)} \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t_1 - t_2)} \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2) \}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

したがって、 $g^{\leq}(1,2)$ の時間に関する Fourier 変換は、

$$g^{\leq}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t_1 - t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} g^{\leq}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) e^{-\frac{i}{\hbar} \omega (t_1 - t_2)} \quad (4.6)$$

ここで、 ω はエネルギーの次元である。

実数時間を複素数に拡張する。 $e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}$ なる因数において、 $t = -i\hbar\beta$ と純虚数にすると $e^{-\beta \mathcal{H}}$ なる Boltzmann factor が出てくる。またこれまで通り純実数では波動函数の時間依存を表わす項になる。この様に時間を複素平面において考えると、量子力学と統計力学のいずれにも使える公式が得られる。

この事によつて $g^>$ と $g^<$ の関係が直ちに導かれる。

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}, t - i\hbar\beta) = e^{\beta \mathcal{H}} \psi_{\sigma}(\vec{r}, t) e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} g^>_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t_1 - t_2 - i\hbar\beta) &= T_T \{ e^{\beta(Q-\mathcal{H})} e^{\beta \mathcal{H}} \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1, t_1) e^{-\beta \mathcal{H}} \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2, t_2) \} \\ &= T_T \{ e^{\beta(Q-\mathcal{H})} \psi^+(2) \psi(1) \} \\ &= g^<_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t_1 - t_2). \end{aligned} \quad (4.8)$$

中島貞雄

これを Fourier 変換すれば、(4.6)より、

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}^{>}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = e^{\beta \omega} g_{\sigma_1 \sigma_2}^{<}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega). \quad (4.9)$$

スペクトル関数を定義する。

$$\begin{aligned} I(1, 2) &\equiv g^{>}(1, 2) + g^{<}(1, 2) \\ &= \langle \psi(1) \psi^+(2) + \psi^+(2) \psi(1) \rangle. \end{aligned} \quad (4.10)$$

$I(1, 2)$ の Fourier 変換を $I(1, 2; \omega)$ とすれば

$$\begin{aligned} I_{\sigma_1 \sigma_2}(1, 2; \omega) &= g_{\sigma_1 \sigma_2}^{>}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) + g_{\sigma_1 \sigma_2}^{<}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) \\ &= (e^{\beta \omega} + 1) g_{\sigma_1 \sigma_2}^{<}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega). \end{aligned} \quad (4.11)$$

スペクトル関数が既知であれば逆に、

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}^{<}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = f(\omega) I_{\sigma_1 \sigma_2}(1, 2; \omega). \quad (\text{electron に関する量}) \quad (4.12)$$

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}^{>}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = (1 - f(\omega)) I_{\sigma_1 \sigma_2}(1, 2; \omega). \quad (\text{hole に関する量}) \quad (4.13)$$

ここで $f(\omega)$ は Fermi 分布函数。

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \omega} + 1}$$

次にスペクトル関数 $I_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega)$ の性質を調べよう。

1) Sum rule

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} I_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (4.14)$$

[証明] 左辺 = $I_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_1)$

$$= \langle \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1, t_1) \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2, t_1) + \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2, t_1) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1, t_1) \rangle$$

$$= \langle \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rangle = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$

ここで、equal-time anticommutator が用いられた。

2) ω を固定すると、

$$I_{\sigma_1 \sigma_2}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = I_{\sigma_2 \sigma_1}(\vec{r}_2, \vec{r}_1; \omega). \quad (4.15)$$

ここで(*)はhermite-conjugate である。

スペクトル関数の $\vec{r}, t$ 表示で、

$$I^*(1, 2) = \langle \psi(2) \psi^\dagger(1) + \psi^\dagger(1) \psi(2) \rangle = I(2, 1)$$

をFourier変換すれば、上の関係が得られる。

ω を固定すれば $I_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega)$ はエルミート行列であるから、適当な基底をえらんで対角化出来る。固有値を $\eta_\lambda(\omega)$ とすれば、

$$I_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = \sum_\lambda \eta_\lambda(\omega) \phi_\lambda(\vec{r}_1, \sigma_1; \omega) \phi_\lambda^*(\vec{r}_2, \sigma_2; \omega). \quad (4.16)$$

(4.12), (4.13) により $g^<, g^>$ についても同様に対角化できる。対角化が簡単に可能な場合は、熱平衡系が、translational symmetry (jellium model) であり、isotropic in spin space (spin-orbit coupling を無視する場合) であるときで、 $g \leq$ や I は、 $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ と $\delta_{\sigma_1, \sigma_2}$ に depend する。

$$g^{\geq}(1, 2) = \frac{\delta_{\sigma_1 \sigma_2}}{V} \sum_{\vec{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} g^{\geq}(\vec{p}; \omega) e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)]} \quad (4.17)$$

$g^{\geq}(\vec{p}; \omega)$ はマトリックスではなく c-数である。

[4.12], [4.13] に対応して、

$$g^<(\vec{p}; \omega) = f(\omega) I(\vec{p}; \omega). \quad (\vec{p}, \omega \text{ の electron を記述する}) \quad (4.18)$$

$$g^>(\vec{p}; \omega) = (1 - f(\omega)) I(\vec{p}; \omega). \quad (\vec{p}, \omega \text{ の hole を記述する}) \quad (4.19)$$

中島貞夫

(4.14) に対応して、Sum ruleは、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} I(\vec{p}; \omega) = 1. \quad (4.20)$$

b) 自由電子モデルの場合

ハミルトニアンは、消滅・生成演算子を用いて

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} \epsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}\sigma} \quad \epsilon_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \mu. \quad (4.21)$$

消滅・生成演算子のハイゼンベルグ表示は、

$$a_{\vec{p}\sigma}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} a_{\vec{p}\sigma} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \quad (4.22)$$

この演算子に対する運動方程式は、

$$\frac{\partial a_{\vec{p}\sigma}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} [\mathcal{H}, a_{\vec{p}\sigma}] e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} = \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}(t). \quad (4.23)$$

これを初期条件 $a_{\vec{p}\sigma}(0) = a_{\vec{p}\sigma}$ の下で解くと、

$$a_{\vec{p}\sigma}(t) = a_{\vec{p}\sigma} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}} t}, \quad a_{\vec{p}\sigma}^{\dagger}(t) = a_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}} t}. \quad (4.24)$$

したがって、

$$\begin{aligned} g^{<}(\vec{p}; t_1 - t_2) &= \langle a_{\vec{p}\sigma}^{\dagger}(t_2) a_{\vec{p}\sigma}(t_1) \rangle \\ &= \langle a_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}\sigma} \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}}(t_1 - t_2)} \\ &= \langle f(\epsilon_{\vec{p}}) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}}(t_1 - t_2)} \end{aligned} \quad (4.25)$$

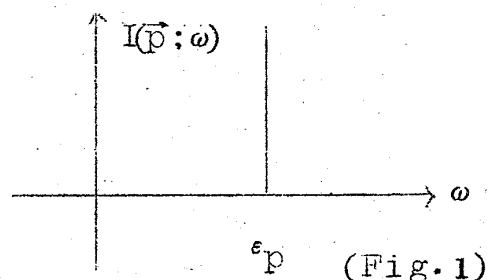
$$g^{>}(\vec{p}; t_1 - t_2) = (1 - f(\epsilon_{\vec{p}})) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}}(t_1 - t_2)} \quad (4.26)$$

$$I(\vec{p}; t_1 - t_2) = e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\vec{p}}(t_1 - t_2)} \quad (4.27)$$

時間に関して Fourier 変換をすれば

$$I(\vec{p}; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_p t} e^{\frac{i}{\hbar} \omega t} = 2\pi \hbar \delta(\omega - \epsilon_p). \quad (4.28)$$

相互作用がない場合、この様にスペクトルは $\omega = \epsilon_p$ の所で鋭い。



c) 熱力学ポテンシャルの計算

スペクトル関数が既知ならば原理的には、 $\mathcal{Q}$ を求めることができる。例えば電子系で、相互作用が 2 体力の場合、すなわちポテンシャルが $v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ のときは、

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint d\vec{r} d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r}). \quad (4.29)$$

相互作用 v を新たに λv と置きかえ、 λ が 0 から 1 まで変りうるとする。相互作用係数が λ における全ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_{\lambda} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_{\text{int}}. \quad (4.30)$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}). \quad (4.31)$$

また熱力学ポテンシャルは、

$$e^{-\beta \mathcal{Q}_{\lambda}} = \text{Tr} \{ e^{-\beta (\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_{\text{int}})} \}. \quad (4.32)$$

上式の両辺を λ について微分をして λ を乗ずると、

$$\begin{aligned} \lambda \frac{\partial \mathcal{Q}_{\lambda}}{\partial \lambda} &= \text{Tr} \{ e^{\beta (\mathcal{Q}_{\lambda} - \mathcal{H}_0 - \lambda \mathcal{H}_{\text{int}})} \lambda \mathcal{H}_{\text{int}} \} = \langle \lambda \mathcal{H}_{\text{int}} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \lambda v(\vec{r} - \vec{r}') \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

一方運動方程式、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\sigma(\mathbf{r}; t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right] \psi_\sigma(\mathbf{r}; t) + \sum_{\sigma'} \int d\mathbf{r}' \lambda v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}'; t) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}'; t) \psi_\sigma(\mathbf{r}; t) \quad (4.34)$$

の両辺に左方から $\psi_\sigma^+(\mathbf{r}; t)$ をかけて、統計平均を行い、次に $\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r}$ の操作をして、(4.33) を用いれば

$$\begin{aligned} \lambda \frac{\partial \mathcal{Q}_\lambda}{\partial \lambda} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \langle \psi_\sigma^+(\mathbf{r}; t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \psi_\sigma(\mathbf{r}; t) \rangle. \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \lim_{\substack{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' \\ t \rightarrow t'}} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) g_{\sigma\sigma}^<(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'). \end{aligned} \quad (4.35)$$

ここで(4.17)を用いて $g_{\sigma\sigma}^<$ の Fourier 変換を代入すれば

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} [\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}] g^<(\mathbf{p}; \omega).$$

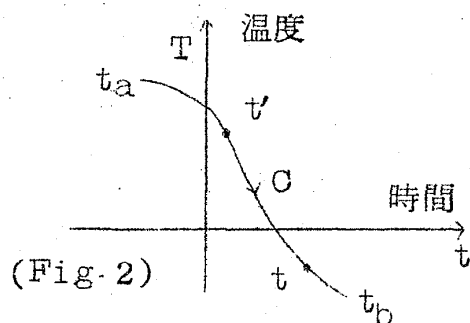
この両辺を λ でわつて、積分すると、(4.18)を用いて、

$$\Delta \mathcal{Q} \equiv \mathcal{Q} - \mathcal{Q}_0 = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} [\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}] f(\omega) I_{\lambda}(\mathbf{p}; \omega). \quad (4.36)$$

$\mathcal{Q}_0$ は $\lambda = 0$ の場合(すなわち自由電子系)の熱力学ポテンシャルである。他の熱力学量は $\mathcal{Q}$ よりすべてわかるが、この λ についての積分は一般には困難である。

1) Green 関数

$g^<, g^>$ を一つにまとめて、Green 関数を定義する。その場合、複素時間の経路を指定しておく必要がある。まず経路 C 上の時間の順序づけを行う。 t_a を出発点、 t_b を終点とすると、 t' と t の順序は t' の方が t より始点に近いとき $t > t'$ と定義する。



また、 t は t' より未来であり、 t' は t より過去である という。

次に順序関係を示す関数を定義する。

$$\begin{aligned}\theta(t-t') &= 1. \quad (t > t') \\ &= 0. \quad (t < t')\end{aligned}\quad (4.37)$$

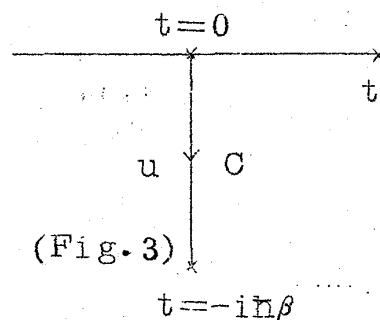
$$\frac{d\theta(t-t')}{dt} = \delta(t-t'). \quad (4.38)$$

以後簡単のため、 $\psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1, t_1) \psi_{\sigma_2}^+(\vec{r}_2, t_2) = \psi(1) \psi^+(2)$ などと略記する。

ここで Wick の T- 記号を導入する。

$$T[\psi(1) \psi^+(2)] \equiv \begin{cases} \psi(1) \psi^+(2). & t_1 > t_2. \\ -\psi^+(2) \psi(1). & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (4.39)$$

これからしばらく経路は次の様にとつて、統計力学的な取扱いをする。



$$t = -i\hbar u \text{ として } 0 < u < \beta \quad (4.40)$$

この経路にそつて一電子 Green 関数を定義する。

$$G(1,2) \equiv -\langle T[\psi(1) \psi^+(2)] \rangle \quad (4.41)$$

$$= -\theta(t_1 - t_2) \langle \psi(1) \psi^+(2) \rangle + \theta(t_2 - t_1) \langle \psi^+(2) \psi(1) \rangle.$$

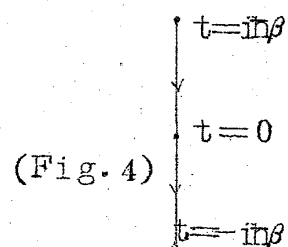
$$= -\theta(t_1 - t_2) g^>(1,2) + \theta(t_2 - t_1) g^<(1,2).$$

G はふたつの branch をもつが、何らかの方法で G が求まれば、解析接続をすることにより、 $g^<, g^>$ は知ることができる。

次に G についての性質を調べてみる。

- 1) (4.41) により $G(1,2)$ の時間依存は $(t_1 - t_2)$ のみであることがわかる。

- 2) G は経路 C において、反周期性 (antiperiodicity) を有する。



中島貞夫

時間順序の定義 (C 上での経路の方向) に注意すれば

$$0 > t_1 - t_2 > i\hbar\beta : G(1,2) = g^<(\dots; t_1 - t_2).$$

$$\begin{aligned} -i\hbar\beta > t_1 - t_2 - i\hbar\beta > 0 : G(\dots; t_1 - t_2 - i\hbar\beta) &= -g^>(\dots; t_1 - t_2 - i\hbar\beta) \\ &= -g^<(\dots; t_1 - t_2). \end{aligned}$$

ここで (4.8) の性質を用いた。これらより、

$$G(\dots; t - i\hbar\beta) = -G(\dots; t). \quad (\text{反周期性}) \quad (4.42)$$

次に $i\hbar\beta < t < -i\hbar\beta$ において、 G を Fourier 級数に展開する。

$$G(\dots; t) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} r_l \exp \left[2\pi i l \frac{t}{2i\hbar\beta} \right]. \quad (4.43)$$

ここで、(4.42) の反周期性を用いれば、

$$e^{-\pi i l} = -1. \quad l = 2n + 1. \quad (4.44)$$

虚数エネルギー変換、

$$i\epsilon_n = \frac{2\pi i}{\beta} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.45)$$

を導入すると、(4.43) は展開係数 r_l を新たに、 $G(\dots; i\epsilon_n)$ として、

$$G(\dots; t) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G(\dots; i\epsilon_n) e^{-\frac{i}{\hbar}(i\epsilon_n)t}. \quad (4.46)$$

複素時間を、Fourier 逆変換によつて

$$G(\dots; i\epsilon_n) = \frac{i}{2\hbar} \int_{-i\hbar\beta}^{-i\hbar\beta + i\hbar\beta} dt G(\dots; t) e^{\frac{i}{\hbar}(i\epsilon_n)t}. \quad (4.47)$$

反周期性により

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\hbar\beta} dt g^>(\dots; t) e^{\frac{i}{\hbar}(i\epsilon_n)t}.$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} g(\dots; \omega) \int_0^{-i\hbar\beta} dt e^{\frac{i}{\hbar}(i\epsilon_n - \omega)t}$$

$e^{i\epsilon_n\beta} = e^{i\pi} = -1$ と [4.13] を用いれば、

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} (1-f(\omega)) I(\dots; \omega) \frac{-e^{-\beta\omega} - 1}{i\epsilon_n - \omega}$$

$1-f(\omega) = \frac{1}{e^{-\beta\omega} + 1}$ を代入すると、次の Green 関数のスペクトル表示をうる。

$$G(\dots; i\epsilon_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} \frac{I(\dots; \omega)}{i\epsilon_n - \omega} \quad (4.48)$$

虚数エネルギーを、一般の複素エネルギーに拡張して、 $i\epsilon_n = \zeta$ と置換する。

$$G(\dots; \zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} \frac{I(\dots; \omega)}{\zeta - \omega} \quad (\text{Cauchy integral}) \quad (4.49)$$

(4.49) は (4.48) の複素エネルギー面への解析接続になっている。

すなわち、(4.49) は ζ が純虚数の $\zeta = i\epsilon_n$ なる無限系列の点で (4.48) に一

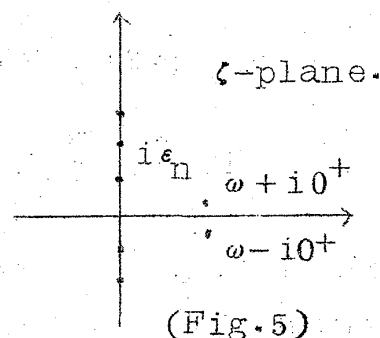
致し、そして $I_m(\zeta) > 0$ である解析関数を完成し、

$I_m(\zeta) < 0$ で一般に他の解析関数を定義する。

$G(\dots; \zeta)$ は上半面と、下半面から、それぞれ実軸

に近づく場合に不連続になる。

$$G(\dots; \omega + i0^+) - G(\dots; \omega - i0^+) \quad (4.50)$$



$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} I(\dots; x) \left[\frac{1}{\omega + i0^+ - x} - \frac{1}{\omega - i0^+ - x} \right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} I(\dots; x) [-2\pi i \delta(\omega - x)]$$

$$= -\frac{i}{\hbar} I(\dots; \omega).$$

$G(\dots; \zeta)$ より、これによつて、スペクトル関数が計算出来る。

e) 自由電子と相互作用がある場合の Green 函数

自由電子のスペクトル関係は (4.28) より、 $I(\vec{p}, \omega) = 2\pi\hbar\delta(\omega - \epsilon_p)$.

(4.49) より、ただちに、

$$G(\vec{p}, \zeta) = \frac{1}{\zeta - \epsilon_p} \quad (4.51)$$

次の様に $\psi_0(\vec{r}, t)$ に対する量子論の方程式を用いて、Green 函数に関する、運動方程式をたててもよい。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right] \psi_0(\vec{r}, t). \quad (4.52)$$

(自由電子の Schrödinger eq.)

上記の方程式を満す $\psi_0(\vec{r}; t)$ に対する Green 函数を (4.41) の様に定義し、次にこれを、 t_1 について微分すると、 θ 関数の微分は、

$$-i\hbar \delta(t_1 - t_2) < \psi(1) \psi(2)^+ + \psi^+(2) \psi(1) > \quad (4.53)$$

$$= -i\hbar \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta(t_1 - t_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \equiv -i\hbar \delta(1, 2).$$

したがって $G(1, 2)$ に対する方程式は、(4.42) を用いて、

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) G(1, 2) = -\hbar \delta(1, 2). \quad (4.53)$$

spin isotopic と translational invariance を考慮して上式を Fourier 変換すれば、

$$(i\epsilon_n - \epsilon_p) G(\vec{p}; i\epsilon_n) = 1. \quad (4.54)$$

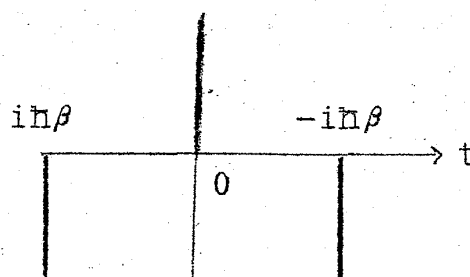
ここで $\delta(t) = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} (i\epsilon_n) t}$ と (4.46) を用いた。

したがって Green 函数は、

$$G(\vec{p}; \epsilon_n) = \frac{1}{i\epsilon_n - \epsilon_p} \cdot G(\vec{p}; \zeta) = \frac{1}{\zeta - \epsilon_p}. \quad (4.55)$$

なお、(4.53)より、 $\delta(t)$ の時間依存性は反周期性を考えに入れると、Fig. 6 の様になる。

次に2体相互作用がある場合、上同様のいわゆる運動方程式の方法で調べると、Green 函数に対する方程式は、



$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U\right) G(1,2) = -i\hbar \delta(1,2) \quad (\text{Fig. 6})$$

$$+ \int dx_3 (-1) v(1,3) \langle T \psi^+(3) \psi(3) \psi(1) \psi^+(2) \rangle. \quad (4.56)$$

上式の右辺第2項は、2電子Green 函数であり、このように1電子Green 函数を定める方程式中に2電子Green 函数が現われ、以下同様にして、この方程式は無限系列をなす。これを近似的に取扱うときは、有限のところでdecoupleする。2電子Green 函数を1電子にfactorizeすれば、これはすでにHartree や Hartree-Fock 近似として、知られているものである。しかしdecoupling は一般には数学的にも物理的にも何を意味しているか不明瞭である。

したがって、相互作用のある場合のGreen函数を求めるには、相互作用の中による摂動展開が堅実な道である。

§5 摂動展開

熱平衡にあるマイクロな体系でおこる非可逆過程（外部から何らかの disturbanceを与えたとき生ずる dissipative phenomena）は熱平衡における fluctuation と同等である。これは、fluctuation-dissipation theorem であり、数学的表現をすれば単なる実験時間を虚数時間におきかえる事によつて得られる、量子力学的 $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ と、統計力学的な $e^{-\beta H}$ との同等性にほかならない。

a) 摂動展開と G-オペレーター

中島貞雄

時間を複素平面において考える。

ハミルトニアンを、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

(5.1)

$\mathcal{H}_1$: interaction

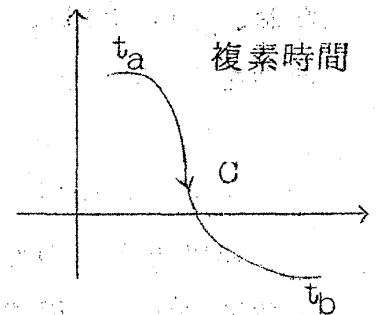


Fig. 1

$\mathcal{H}_1$ についての巾展開を行う。

t が実数の場合は量子力学の摂動展開で、虚数の場合は統計力学の展開に相当する。

まず、次の様なオペレーター $L(t)$ を定義する。

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} L(t). \quad (5.2)$$

時間微分をとると、

$$-\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} L(t) + e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \frac{\partial L(t)}{\partial t}. \quad (5.3)$$

$L(t)$ に対する運動方程式は、これより、

$$\frac{\partial L(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1(t) L(t). \quad \mathcal{H}_1(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \quad (5.4)$$

次に、新たなオペレーター U を定義する。

$$L(t) = U(t; t_a) L(t_a). \quad (5.6)$$

U に対する運動方程式は、(5.4) より、

$$\frac{\partial U(t; t_a)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1(t) U(t; t_a) \quad (5.7)$$

これを、次の初期条件の下で積分方程式に変換する。

$$U(t_a; t_a) = 1. \quad (\text{初期条件}) \quad (5.8)$$

$$U(t; t_a) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^t dt_1 \mathcal{H}_1(t_1) U(t_1; t_a). \quad (\text{複素積分}) \quad (5.9)$$

(5.9) を iteration によつて解くと、

$$1 \text{ st order} : U_1(t; t_a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^t dt_1 \mathcal{H}_1(t_1).$$

$$2 \text{ nd order} : U_2(t; t_a) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_a}^t dt_1 \int_{t_a}^{t_1} dt_2 \mathcal{H}_1(t_1) \mathcal{H}_1(t_2).$$

$$n\text{-th order} : U_n(t; t_a) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_a}^t dt_1 \int_{t_a}^{t_1} dt_2 \dots$$

$$\int_{t_a}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{H}_1(t_1) \mathcal{H}_1(t_2) \dots \mathcal{H}_1(t_n). \quad (5.10)$$

これらによつて、

$$U(t; t_a) = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t; t_a). \quad \text{ただし } U_0 = 1. \quad (5.11)$$

(5.10) を対称的に表わす。

$$U(t; t_a) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_a}^t dt_1 \dots \int_{t_a}^t dt_n \theta(t-t_1) \theta(t_1-t_2) \dots \theta(t_{n-1}-t_n) \times \\ \times \mathcal{H}_1(t_1) \mathcal{H}_1(t_2) \dots \mathcal{H}_1(t_n).$$

Dyson の P- 記号を用いれば

$$U(t; t_a) = \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_a}^t dt_1 \dots \int_{t_a}^t dt_n P[\mathcal{H}_1(t_1) \mathcal{H}_1(t_2) \dots \mathcal{H}_1(t_n)]. \quad (5.12)$$

P- 記号は時間の順序にならべかえるオペレーターであり、

$$P[A_1(t_1) \dots A_n(t_n)] = \sum_P \theta(t_{r_1}-t_{r_2}) \theta(t_{r_2}-t_{r_3}) \dots \theta(t_{r_{n-1}}-t_{r_n}) \times \\ \times A_{r_1}(t_{r_1}) A_{r_2}(t_{r_2}) \dots A_{r_n}(t_{r_n}). \quad (5.13)$$

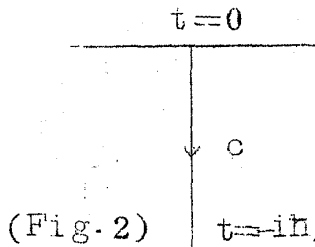
$\sum_P$ は $n!$ 個のあらゆる置換 $(1^2 \dots n)_{r_1 r_2 \dots r_n}$ についての和である。(5.13)

(Fig. 1) 図で t_b に近い時間をもつものをより左に、オペレーターをならべることになる。

一般に $\mathcal{U}_1(t)$ の内には $\psi^\dagger(t)\psi(t)$ の対の形で field operator が入ってくるので、P- 記号を wick の T- 記号にかえてもよい。

$$U(t_b; t_a) = T[\mathcal{G}].$$

$$\mathcal{G} \equiv \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{U}_1(t) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \dots \int_{t_a}^{t_b} dt_n \mathcal{U}_1(t_1) \dots \mathcal{U}_1(t_n). \quad (5.14)$$



積分路として Fig. 2 の様なものをえらぶ。

$$t_a = 0, \quad t_b = -i\hbar\beta.$$

(Fig. 2) $L(t)$ の定義より、 $L(0) = 1$ となる。

すると、Boltzmann factor は、[5.2], [5.6] より $t = -i\hbar\beta$ とすることによつて、

$$e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{-\beta \mathcal{H}_0} U(-i\hbar\beta; 0) = e^{-\beta \mathcal{H}_0} T[\mathcal{G}]. \quad (5.15)$$

$$\mathcal{G} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\hbar\beta} dt \mathcal{U}_1(t) \right] \quad (5.16)$$

熱力学ポテンシャル Ω の展開はこれよりただちに、

$$e^{-\beta \Omega} \equiv \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \} = \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} T[\mathcal{G}] \}. \quad (5.17)$$

さらに、相互作用がない場合の Ω_0 に対する、

$$e^{-\beta \Omega_0} = \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \} \quad (5.18)$$

また、相互作用のない系 (温度: T , 化学ポテンシャル: μ) での統計平均を、

$$\langle Q \rangle_0 \equiv \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta \mathcal{H}_0} Q\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta \mathcal{H}_0}\}} \quad (5.19)$$

を用いれば、(5.17)は、

$$e^{-\beta \Omega} = e^{-\beta \Omega_0} \langle T[\mathcal{C}] \rangle_0 \quad (5.20)$$

b) 1 電子 Green 関数の摂動展開

$U(t; t_a)$ の満す微分方程式 (5.7) より

$$\frac{\partial}{\partial t} [U(t; t_a) U^{-1}(t'; t_a)] = \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1(t) U(t; t_a) U^{-1}(t'; t_a). \quad (5.21)$$

これを初期条件、 $U(t'; t_a) U^{-1}(t'; t_a) = 1$.

の中で、(5.7) の解を用いて、とくと、 $t > t'$ として、

$$U(t; t_a) U^{-1}(t'; t_a) = T \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t \mathcal{H}_1(t_1) dt_1 \right) \right]. \quad (5.22)$$

次に電子の field operator に対する相互作用表示は、

$$\psi_\sigma(\vec{r}; t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \psi_\sigma(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t}. \quad (5.23)$$

Heisenberg 表示との関係は、

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(\vec{r}; t) &\equiv e^{\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) t} \psi_\sigma(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) t} \\ &= L^{-1}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \psi_\sigma(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} L(t) = L^{-1}(t) \psi_\sigma(\vec{r}; t) L(t) \\ &= U^{-1}(t; 0) \psi_\sigma(\vec{r}; t) U(t; 0) \end{aligned} \quad (5.24)$$

以上のことを用いて Green 関数の展開を求める。

$G(1, 2) = -\langle T[\psi(1)\psi^\dagger(2)] \rangle$ であるから、 $t_1 > t_2$ の場合、

中島貞雄

$$\begin{aligned}
& e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)} \psi(1) \psi^+(2) \\
&= e^{-\beta\mathcal{H}_0} U(-i\hbar\beta; 0) U^{-1}(t_1; 0) \psi(1) U(t_1; 0) U^{-1}(t_2; 0) \psi^+(2) U(t_2; 0) \\
&= e^{-\beta\mathcal{H}_0} (T[\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{-i\hbar\beta} \mathcal{H}_1(s) ds)]) \psi(1) (T[\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_2}^{t_1} \mathcal{H}_1(s) ds)]) \times \\
&\quad \times \psi^+(2) (T[\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_2} \mathcal{H}_1(s'') ds'')]) .
\end{aligned}$$

時間の順序に operator がなっているから、T をまとめて、

$$\begin{aligned}
&= e^{-\beta\mathcal{H}_0} T[\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{-i\hbar\beta} \mathcal{H}_1(s) ds) \psi(1) \exp(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_2}^{t_1} \mathcal{H}_1(s) ds) \psi^+(2) \times \\
&\quad \times \exp(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_2} \mathcal{H}_1(s'') ds'')].
\end{aligned}$$

$\mathcal{H}_1(s)$ には、 $\psi^+\psi$ の形で ψ が入っているので、T 記号のもとでは ψ, ψ^+ と可換であり、上式は

$$\begin{aligned}
&= e^{-\beta\mathcal{H}_0} T[\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\hbar\beta} \mathcal{H}_1(s) ds) \psi(1) \psi^+(2)] . \quad (5.25) \\
&= e^{-\beta\mathcal{H}_0} T[\mathcal{G} \psi(1) \psi^+(2)] .
\end{aligned}$$

$t < t_2$ の場合も同様にして、

$$e^{-\beta\mathcal{H}} \psi^+(2) \psi(1) = e^{-\beta\mathcal{H}_0} T[\mathcal{G} \psi^+(2) \psi(1)] . \quad (5.26)$$

したがって、これらより、

$$\begin{aligned}
G(1,2) &\equiv - \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}} T[\psi(1) \psi^+(2)]\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}} \\
&= - \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}_0} T[\mathcal{G} \psi(1) \psi^+(2)]\}}{e^{-\beta\Omega_0} \langle T[\mathcal{G}] \rangle_0} .
\end{aligned}$$

すなわち、

$$G(1,2) = - \frac{\langle T[\psi(1)\psi(2)]^+ \rangle_0}{\langle T[\psi]\psi \rangle_0} \quad \text{.. (1 電子 Green 関数) (5.27)}$$

c) 2 体相互作用での電子の Green 関数

自由電子モデルに 2 体力相互作用を摂動として入れる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right] \psi_{\sigma}(\vec{r}). \quad (5.28)$$

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint d\vec{r} d\vec{r}' v(\vec{r}-\vec{r}') \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r}). \quad (5.29)$$

$v(\vec{r}-\vec{r}')$: 2 体相互作用ポテンシャル。

また、fieldoperator を、 $\psi_{\sigma}(\vec{r};t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \psi_{\sigma}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} a_{p\sigma} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}\vec{r} - \epsilon_p t)}$ と表わす。

$$\epsilon_p = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \mu.$$

相互作用ハミルトニアンを相互作用表示にする。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1(t) &\equiv e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint d\vec{r} d\vec{r}' v(\vec{r}-\vec{r}') \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r};t) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}';t) \psi_{\sigma'}(\vec{r}';t) \psi_{\sigma}(\vec{r};t) \end{aligned} \quad (5.30)$$

したがって $\mathcal{G}$ - オペレーターは、

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} dt \mathcal{H}_1(t) \right] \\ &= \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} \iint dx dy U(x-y) \psi^{\dagger}(x) \psi^{\dagger}(y) \psi(y) \psi(x) \right]. \end{aligned} \quad (5.31)$$

ここで簡単のために、

中島貞雄

$$x \equiv (\vec{r} : t : \sigma), \quad \int dx \equiv \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \int_0^{-i\hbar\beta} dt,$$

$$U(x-y) \equiv v(\vec{r}-\vec{r}')\delta(t-t')$$

と略記する。

T- 記号内で (5.31) は、

$$G = \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} \iint dx dy U(x-y) \psi^{\dagger}(x) \psi(x) \psi^{\dagger}(y) \psi(y)\right]$$

と書けるから、

(5.27) の分子に対する表示は、

$$G(x, x') \equiv \langle T [\psi(x) \psi^{\dagger}(x')] \rangle_0$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{2\hbar}\right)^n \iint dx_1 dy_1 \cdots dx_n dy_n U(x_1-y_1) \cdots U(x_n-y_n) \times \\ &\quad \times \langle T [\psi^{\dagger}(x') \psi(x) \psi^{\dagger}(x_1) \psi(y_1) \cdots \psi^{\dagger}(x_n) \psi(y_n)] \rangle_0 \end{aligned} \quad (5.32)$$

上式の $\langle T \cdots \rangle_0$ の計算には Wick の定理が使われる。

その方法は、 $\langle T \cdots \rangle_0$ を $\langle \psi^{\dagger} \psi \rangle_0$ の積に因数分解するもので、証明は Abrikosov や阿部竜蔵の教科書を参照されたい。注意を要することは、この方法で、Fermion や Boson などの operator の交換関係がいずれも、次の、c- 数条件を満たしていることを、使っている。

$$[\psi(x), \psi^{\dagger}(x)]_+ = c \text{ 数}; \quad [\phi(x), \phi^{\dagger}(x)]_- = c \text{ 数.}$$

たとえば金属中の原子が localized magnetic moment をもっていて、そのスピン operator S が伝導電子と、 $\vec{s} \cdot \vec{\sigma}$ なる相互作用をする場合、スピン operator の交換関係が、 $[s_i, s_j] = i s_k$ であり、Wick の定理を直接用いることは出来ない。

因数分解の方法は、次の公式を用いる。

$$\begin{aligned}
 & \langle T[\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_1)\psi^+(\xi_2)\psi(\eta_2)\cdots\psi^+(\xi_n)\psi(\eta_n)] \rangle_0 \\
 &= \sum_{\substack{1\cdots n \\ r_1\cdots r_n}} (\pm 1) \langle T[\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_{r_1})] \rangle_0 \langle T[\psi^+(\xi_2)\psi(\eta_{r_2})] \rangle_0 \cdots \\
 & \quad \cdots \langle T[\psi^+(\xi_n)\psi(\eta_{r_n})] \rangle_0. \quad (5.33)
 \end{aligned}$$

総和は、すべての置換に関してとり、 $\left(\begin{array}{ll} \text{偶置換} & +1 \\ \text{奇置換} & -1 \end{array} \right.$ をそれぞれ与える。

例えば、

$$\begin{aligned}
 & \langle T[\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_1)\psi^+(\xi_2)\psi(\eta_2)] \rangle_0 \\
 &= \langle T[\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_1)] \rangle_0 \langle T[\psi^+(\xi_2)\psi(\eta_2)] \rangle_0 \\
 & \quad - \langle T[\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_2)] \rangle_0 \langle T[\psi^+(\xi_2)\psi(\eta_1)] \rangle_0.
 \end{aligned}$$

一般の場合置換の符号が問題になる。

次の例からもわかるように、置換は cycle, さらに互換へと分解できる。

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 1 & 4 & 5 & 3 \end{pmatrix} = \underset{\mu=2}{(1\ 2)} \underset{\mu=3}{(3\ 4\ 5)} = (1\ 2)(3\ 4)(3\ 5).$$

今、 $\begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ r_1 & \cdots & r_n \end{pmatrix}$ が λ 個の cycle の積に分解されたとし、その各々の cycle の長さを $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_\lambda$ とすれば、 $\sum_k \mu_k = n$ である。

次に長さ、 μ_k の cycle は $(\mu_k - 1)$ 個の互換の積で書ける。

1 個の互換に対して (5.33) より (-1) の符号が出るから、この置換に対しては、

$$(-1)^{(\mu_1-1)+(\mu_2-1)+\cdots+(\mu_\lambda-1)} = (-1)^{\sum \mu_k - \lambda} = (-1)^n (-1)^\lambda$$

によつて符号が定まる。

中島貞雄

したばつて、置換 P に対する、cycle の数を λ とすれば、[5.33] は、

$$\begin{aligned} & \langle T(\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_1) \cdots \psi^+(\xi_n)\psi(\eta_n)) \rangle_0 \\ &= (-1)^n \sum_P (-1)^\lambda \langle T(\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_{P1})) \rangle_0 \cdots \langle T(\psi^+(\xi_n)\psi(\eta_n)) \rangle_0. \end{aligned} \quad (5.34)$$

上式の分解で因数に現われているものは、自由電子の Green 関数 $G^{(0)}$ である。

$$G^{(0)}(\eta, \xi) \equiv \langle T(\psi^+(\xi)\psi(\eta)) \rangle_0 \quad (5.35)$$

$G^{(0)}$ は既知であるから原理的に、 $G(1,2)$ は求めることができる。

d) Feymann diagram

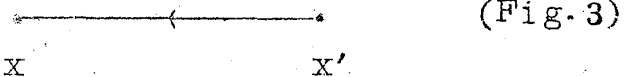
(5.32) の式で第 n 次項の部分、

$$\langle T(\psi^+(x)\psi(x)\psi^+(x_1)\psi(x_1)\psi^+(y_1)\psi(y_1) \cdots \psi^+(y_n)\psi(y_n)) \rangle_0$$

であるが、これの因数分解を公式 (5.33) に従つて求めると、項の数は $(2n+1)!$ になる。次数が上ればこの数は莫大になる。そこで各項にグラフを対応させて見通しをよくする。

$$n=0 \text{ の場合} \quad \langle T(\psi^+(x')\psi(x)) \rangle_0 = G^{(0)}(x, x').$$

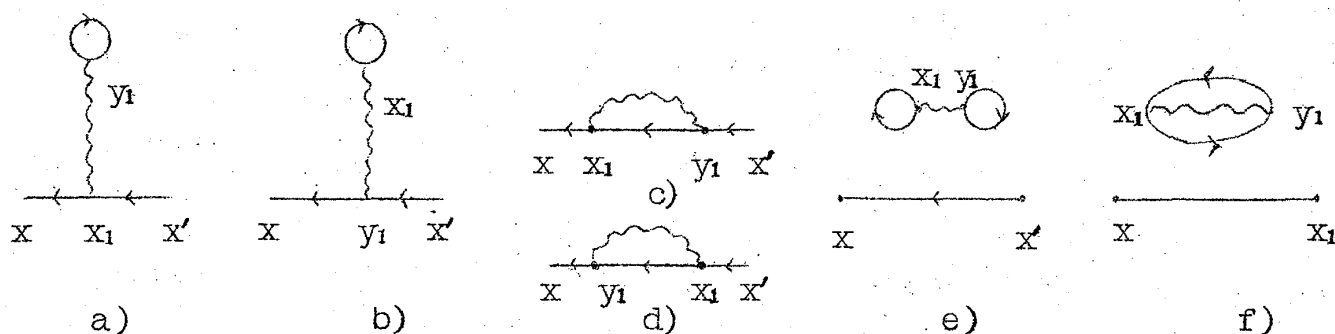
この項には次の様な、電子を x' で create して、 x で annihilate する意味を示す図を対応させる。



$$n=1 \text{ の場合} \quad U(x_1 - y_1) \langle T(\psi^+(x')\psi(x)\psi^+(x_1)\psi(x_1)\psi^+(y_1)\psi(y_1)) \rangle_0$$

この項は x_1 と y_1 との間での相互作用を含む。

項の数は $(2+1)! = 6$ であり、それぞれに対するグラフは、



(Fig. 4)

常に x' では実線が出発し、 x では実線が入るが、その他の点では入るものと出るもの、また相互作用を表わす波線がある。

線についての名称は次のとおりです。

— : 電子線 (electron line) ~~~~~ : interaction line.

  : 電子外線 (external line)

$x_i \longleftarrow x_j$: 電子内線 (internal line)

グラフより対応する展開項を求める。

Wick の戻理の符号定数をしらべる。

x' より x に電子線のみでつながっているのは、一つのcycle に対応するので、 (-1) が出てくる。さらに、closed electron line loop の数を ℓ 個とすれば、これもまたcycle に相当するので $(-1)^\ell$ がつく。

n 次の項は $2n+1$ 個の Ψ オペレータをふくむので、

$$(-1)^{2n+1}(-1)(-1)^l = (-1)^l.$$

がWickの定理にいう符号 ϵ をきめる。あるグラフの寄与をもとめるには、電子線に $q^{(0)}$ 、相互作用線には U を対応させて積をとり内点について積分する。たとえばa) に対する項を求めると、

$$\underbrace{(-1)(-\frac{i}{2\hbar})}_{\text{摂動係数}} \iint dx_1 dy_1 U(x_1 - y_1) G^{(\theta)}(x_1, x') \times G^{(0)}(x_1, x') G^{(0)}(y_1, y_1)$$

中島貞雄

時間座標の一致した Green 関数の定義は、operator の順序を考えて

$$G^{(0)}(y_1, y_1) \equiv \lim_{\substack{t_2 > t_1 \\ t_2 \rightarrow t_1}} G^{(0)}(y_1, y_2) \quad (5.36)$$

a), b), c), d), の様にあらゆる部分が結びついているグラフを connected graph, e), f) の様なものを disconnected とする。

以下で示すように、disconnected graphは、 $G(x, x')$ において、その帰与は分母にある、 $\langle T[\phi] \rangle_0$ と cancel するので考えなくともよい。

すなわち、次の公式を得る。(5.32) の分母をとつて、

$$G(x, x') = -\langle T[\phi \psi(x) \psi^+(x')] \rangle_{0c}. \quad (5.37)$$

c: connected graph についての和。

〔証明〕 分子の $G(x; x') = -\langle T[\phi \psi(x) \psi^+(x')] \rangle_0$ について調べる。

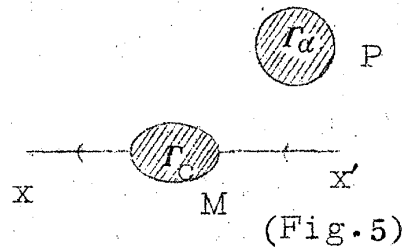
あらゆるグラフは Fig. 5 の様な電子外線と連結した connected part Γ_c と連結してない disconnected part Γ_d との部分に分けて書ける。

Γ_c の変数は $(x_1, y_1, \dots, x_m, y_m)$

で、これの $G^{(0)}$ の積よりの帰与を M で示す。

Γ_d の変数は $(x_{m+1}, y_{m+1}, \dots, x_{m+p}, y_{m+p})$ で、

これの $G^{(0)}$ の積よりの帰与を P で示す。(m+p) 次のグラフに着目して、



$$\begin{aligned} & \frac{1}{(m+p)!} \left(-\frac{i}{2\pi}\right)^{m+p} \int dx_1 dy_1 \dots dx_m dy_m dx_{m+1} dy_{m+1} \dots dx_{m+p} dy_{m+p} \times \\ & \times U(x_1 - y_1) \dots U(x_m - y_m) U(x_{m+1} - y_{m+1}) \dots U(x_{m+p} - y_{m+p}) \times \\ & \times M(x, x'; x_1, y_1, \dots, x_m, y_m) P(x_{m+1}, y_{m+1}, \dots, x_{m+p}, y_{m+p}). \quad (5.38) \end{aligned}$$

$(x_1, \dots, x_m)$ の組と $(x_{m+1}, \dots, x_{m+p})$ の組との間で変数の入れ換えをしても積分は同一の帰与を与える。(y 変数の組も同様の入れ換えをする)

その様な入れ換えの数は $\binom{m+P}{m} = \frac{(m+P)!}{m!P!}$ となり (5.38) にかけて、 Γ_d と Γ_c とは完全に因数に分解される。

今 Γ_c を固定して、すなわちある一定のトポジカルなグラフに定めて、次の和を考える

$$\sum_{\substack{\Gamma_d \text{ で加える。}}} \sum_{\substack{\text{同等なグラフで加える。}}} \Gamma_d \Gamma_c = \Gamma_c' \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \left(-\frac{i}{2\hbar}\right)^P \iint d\xi_1 d\eta_1 \cdots d\xi_p d\eta_p \times \\ \times U(\xi_1 - \eta_1) \cdots U(\xi_p - \eta_p) \langle T[\psi^+(\xi_1)\psi(\eta_1) \cdots \psi^+(\xi_p)\psi(\eta_p)] \rangle >_0 \\ = \Gamma_c' \langle T[\phi] \rangle >_0 \quad (5.39)$$

ここで Γ_d, Γ_c は (5.38) を因数分解した形を示す。 Γ_c で同等なグラフの和を Γ_c' とした。ここで、connected part で、すべてのトポロジカルに異なるグラフの和をとれば、

$$\mathcal{G}(x, x') = \langle T[\psi^+(x')\psi(x)] \rangle_{0c} \cdot \langle T[\] \rangle. \quad (5.40)$$

したがって、(5.37) は証明された。