シュレーディンガー方程式のグリーン関数

最初に時間独立な 1 次元シュレーディンガー方程式のグリーン関数を求めます。その後に時間依存するシュレーディンガー方程式の場合を扱います。
複素積分が出てきますが、留数定理をある程度知っているとしています。

自由粒子での時間依存しない 1 次元シュレーディンガー方程式でのグリーン関数を求めます。グリーン関数が分かれば、形式的に非同次なときの解が求められたことになります。
時間独立なシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_0(x) = E\psi_0(x)$$

左辺に全部持っていき

$$(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})\psi_0(x) = 0$$

非同次の項 $f(x)$ を加えて

$$(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})\psi(x) = f(x) \tag{1}$$

これに対応するグリーン関数 $G(x', x)$ を

$$(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})G(x', x) = \delta(x', x)$$

と定義します。グリーン関数によって、非同次微分方程式 (1) の解は

$$\psi(x') = \psi_0(x') + \int dx\ G(x', x)f(x)$$

となります。ψ_0 は同次での一般解です。これは

$$\begin{aligned}
(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})\psi(x') &= (E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})\psi_0(x') + (E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})\int dx\ G(x', x)f(x) \\
&= \int dx\ f(x)(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})G(x', x) \\
&= \int dx\ f(x)\delta(x' - x) \\
&= f(x')
\end{aligned}$$

となることから確かめられます。
実際に、グリーン関数の式がシュレーディンガー方程式から出てくることを見ます。ブラケット表記において、演算子 $\hat{L}$ の逆 $\hat{G}$ が存在するとして

$$\hat{L}\hat{G} = 1$$

1 は恒等演算子です。位置の固有状態 $|x\rangle, \langle x'|$ で挟むと、位置は連続的に取るので

$$\langle x'|\hat{L}\hat{G}|x\rangle = \langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \tag{2}$$

左辺は完全性から

$$\langle x'|\hat{L}\hat{G}|x\rangle = \int dy \langle x'|\hat{L}|y\rangle\langle y|\hat{G}|x\rangle \tag{3}$$

と変形できます。$\langle y|\hat{G}|x\rangle$ を x, y を変数にする関数 $G(x, y)$ とします。そして、$\hat{L} = E - \hat{H}$ として挟めば

$$\langle x'|\hat{L}|x\rangle = \hat{L}\langle x'|x\rangle = (E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})\delta(x'-x) \tag{4}$$

(3) と (4) を合わせることで

$$\int dy(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})\delta(x'-y)G(y, x) = (E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})G(x', x)$$

となるので、(2) から $G(x', x)$ が満たす方程式は

$$(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2})G(x', x) = \delta(x', x)$$

となります。このように、$\hat{L}$ の逆 $\hat{G}$ からグリーン関数 $G(x', x)$ は作られています。
　$\hat{G}$ は適当な状態に対して

$$\hat{G}|b\rangle = |c\rangle$$

と作用するとして、$|\alpha\rangle$ で挟めば

$$\langle\alpha|\hat{G}|b\rangle = G(\alpha, b)\ ,\ \psi_c(\alpha) = \langle\alpha|c\rangle$$

$\psi_c(\alpha)$ は波動関数です。連続な状態 $|\beta\rangle$ の完全性を使うことで

$$\psi_c(\alpha) = \langle\alpha|\hat{G}|b\rangle = \int d\beta\langle\alpha|\hat{G}|\beta\rangle\langle\beta|b\rangle = \int d\beta\ G(\alpha, \beta)\langle\beta|b\rangle = \int d\beta\ G(\alpha, \beta)\psi_b(\beta)$$

となり、関数から関数への変換部分になるというグリーン関数の性質を導けます。
　次にグリーン関数のスペクトル表示を示します。エルミート演算子を $\hat{A}$、その固有値を a_n、正規直交系の固有状態を $|a_n\rangle$ とします。このとき $\hat{A}$ を

$$
\begin{aligned}
\hat{A}|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\
\hat{A}|a_n\rangle\langle a_n| &= a_n|a_n\rangle\langle a_n| \\
\hat{A}\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| &= \sum_n a_n|a_n\rangle\langle a_n| \\
\hat{A} &= \sum_n a_n|a_n\rangle\langle a_n|
\end{aligned}
$$

と展開したものをスペクトル表示やスペクトル分解と言います。また、このときの

$$
P_n = |a_n\rangle\langle a_n|
$$

を射影演算子と呼びます。

ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値を E_n、対応する固有状態を $|n\rangle$ とすれば $\hat{G}$ は

$$
\begin{aligned}
\hat{G} = (E-\hat{H})^{-1} &= \sum_{n'}\sum_n |n'\rangle\langle n'|(E-\hat{H})^{-1}|n\rangle\langle n| \\
&= \sum_{n'}\sum_n |n'\rangle(E-E_n)^{-1}\langle n|\delta_{nn'} \\
&= \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E-E_n}
\end{aligned}
$$

$\hat{H}^{-1}$ は $\hat{H}^{-1}\hat{H}=1$ なので、$(E-\hat{H})^{-1}$ の固有値は $(E-E_n)^{-1}$ となります。これで正しいことは

$$
\begin{aligned}
\hat{L} &= E-\hat{H} \\
&= \sum_{n'}\sum_n |n'\rangle\langle n'|E-\hat{H}|n\rangle\langle n| \\
&= \sum_{n'}\sum_n (E-E_n)|n'\rangle\langle n|\delta_{nn'} \\
&= \sum_n (E-E_n)|n\rangle\langle n|
\end{aligned}
$$

から

$$
\hat{L}\hat{G} = \sum_{n'}\sum_n |n\rangle\langle n|n'\rangle\langle n'| = 1
$$

となることから確かめられます。この $\hat{G}$ を別の状態 a, b で挟むと

$$
\langle b|\hat{G}|a\rangle = G(a,b) = \sum_n \frac{\langle b|n\rangle\langle n|a\rangle}{E-E_n}
$$

となり、これがグリーン関数でのスペクトル表示と呼ばれます。
周期的境界条件の下でのグリーン関数をスペクトル表示にします。周期的境界条件は波動関数に対して

$$\psi(x) = \psi(x+L)$$

このときの、ハミルトニアン演算子の固有値は (「シュレーディンガー方程式の解」参照)

$$E_n = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2mL^2}n^2 \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

位置を変数に持つグリーン関数を求めるには、位置の固有状態 $|x\rangle, |x'\rangle$ で挟めばいいので、$\langle x|n\rangle$ を求めます。このとき $|n\rangle$ は運動量の固有状態にもなっているとして (自由粒子の場合は運動量の固有状態はハミルトニアンの固有状態にもなっている)

$$\langle x|\hat{p}|n\rangle = p_n\langle x|n\rangle$$

これは微分方程式

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|n\rangle = p_n\langle x|n\rangle$$

になるので

$$\langle x|n\rangle = C\exp[\frac{i}{\hbar}p_n x]$$

任意定数 C は境界条件と確率の規格化によって ($\langle x|n\rangle = \psi_n(x)$)

$$\int_0^L |\langle x|n\rangle|^2 dx = |C|^2 L = 1 \ \Rightarrow \ C = \sqrt{\frac{1}{L}}$$

また、運動量も境界条件によって

$$p_n = \frac{2n\pi}{L}\hbar$$

なので、周期的境界条件でのグリーン関数は

$$G(x', x) = \sum_n \frac{\langle x'|n\rangle\langle n|x\rangle}{E - E_n} = \frac{1}{L}\sum_n \frac{\exp[i\frac{2n\pi}{L}(x'-x)]}{E - \frac{(2\pi\hbar)^2}{2mL^2}n^2}$$

と求まります。グリーン関数は位置の差 $x' - x$ の関数となっています。
状態が連続的な場合も求めます。連続的な固有状態 $|k\rangle$ について同じことをするだけです。シュレーディンガー方程式は

$$(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2)\psi(x) = 0 \quad (k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2})$$

とします。$\partial^2/\partial x^2=-\hat{p}^2/\hbar^2=-\hat{k}^2$ (k は波数) なので、$\hat{k}$ の固有値を k として

$$\begin{aligned}\hat{G}=(k_0^2-\hat{k}^2)^{-1}&=\int dk'\int dk|k'\rangle\langle k'|(k_0^2-\hat{k}^2)^{-1}|k\rangle\langle k|\\&=\int dk'\int dk\delta(k'-k)|k'\rangle(k_0^2-k^2)^{-1}\langle k|\\&=\int dk\frac{|k\rangle\langle k|}{k_0^2-k^2}\end{aligned}$$

そして、波数と位置の内積は

$$\langle x|k\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp[ikx]$$

なので、連続的な波数に対して

$$G(x',x)=\int\frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{k_0^2-k^2}\tag{5}$$

ここで、k の範囲をあらゆる波数として、積分範囲を $-\infty$ から $+\infty$ とします。この積分は $k_0^2-k^2$ のために特異点 (極) を持っていて、複素積分で実行できます。

今はグリーン関数の式を変形していっただけなので、グリーン関数に条件 (境界条件) が入っていません。なので、境界条件によって極を避けるようにします。

まず、複素積分を行うことを考えます。留数定理から (数学の「複素積分」参照)、積分は

$$\int_C dz\ f(z)=2\pi i\mathrm{Res}(f,a)$$

このように書くことができます。C は複素平面上の反時計周りの閉じた積分経路 (閉曲線) で、a はその閉じた経路の内側にいるとします。Res は留数を表わす記号で、a で極を持つ関数 $f(z)$ の留数という意味です。ここでは単純な 1 位の極と呼ばれる状況でしかないので、留数は

$$\mathrm{Res}(f,a)=\lim_{z\to a}(z-a)f(z)$$

このように与えられます。

(5) は

$$G(x',x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{k_0^2-k^2}=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{(k-k_0)(k+k_0)}$$

と変形できるので、極は $k=\pm k_0$ の 2 つです。これらは積分経路 $-\infty\sim\infty$ 上にいるので、この極を処理しないといけません。この極の処理の仕方がグリーン関数に境界条件を与えることと同じになります。

簡単に言ってしまえば、積分経路上に極がいなければいいので、極を避けるように積分経路を設定すればいいだけです (積分経路の設定が境界条件になる)。これは積分経路を変更する複素積分のよくある話で出来ます。しかし、もっと見た目が分かりやすい別の方法を使います。

今の場合では、k_0 に $i\epsilon$ $(\epsilon > 0)$ を加えて

$$G(x', x) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\exp[i(x'-x)k]}{(k-k_0-i\epsilon)(k+k_0+i\epsilon)} = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\exp[i(x'-x)k]}{k^2-k_0^2-i\epsilon} \tag{6}$$

として計算後に $\epsilon \to 0$ にするようにします。こうすれば $\pm k_0$ の極を避けることができます。実際に、極は $k_0 + i\epsilon$ と $-k_0 - i\epsilon$ なので、$-\infty \sim \infty$ の実軸上からいなくなります。ただし、$i\epsilon$ は勝手に加えたことから分かるように、任意性があり、他の加え方も出来ます。$i\epsilon$ をどう加えるかで結果が異なるので、必要な解になるように選ぶ必要があります。今の選び方は後で見るように、先進、遅延グリーン関数に対応します (電磁気学の「ヘルツダイポールアンテナ」や場の量子論の「伝播関数について」参照)。

積分 (6) を留数定理から求めるために、積分経路に手を加えます。積分経路を閉曲線にしたいので、原点を中心にする半径 R の上半円を加えます。これによって積分範囲は $-R$ から $+R$ に行き、$+R$ から半径 R の上半円を通って $-R$ に行くようになります (R は後で無限大にする)。つまり、実軸と上半円によって構成される閉じた経路 C となります。$-R$ から R の経路を C_1、R から $-R$ への上半円の経路を C_2 とすれば

$$\int_C f(k)dk = \int_{C_1} f(k)dk + \int_{C_2} f(k)dk$$

となります ($f(k)$ は被積分関数)。このとき $x' > x$ では R を無限大に持っていけば右辺の第二項は消えます (ジョルダンの補題)。なので

$$\int_C f(k)dk = \int_{C_1} f(k)dk + \int_{C_2} f(k)dk \;\Rightarrow\; \int_C f(k)dk = \int_{C_1} f(k)dk = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)dk$$

となり、閉じた経路 C による積分は (6) の積分の形になります。というわけで、留数定理によって (6) は計算できます。

もう 1 つ別の経路 C' も作れます。これは単純に C_2 を $+R$ から $-R$ へ向かう下半円に変えるだけです。この下半円の経路を C'_2 とすれば

$$\int_{C'} f(k)dk = \int_{C_1} f(k)dk + \int_{C'_2} f(k)dk$$

今度は、$x > x'$ のときに下半円の経路 C'_2 からの寄与が消えて (ジョルダンの補題)

$$\int_{C'} f(k)dk = \int_{C_1} f(k)dk + \int_{C'_2} f(k)dk \;\Rightarrow\; \int_{C'} f(k)dk = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)dk$$

となります。経路 C' も閉じた経路になっているので、この場合も留数定理によって計算できます。

経路 C と経路 C' の違いは経路 C は極 $k_0 + i\epsilon$ を含み、経路 C' は極 $-k_0 - i\epsilon$ を含んでいる点です。なので、留数定理において、使う極が経路 C と経路 C' で異なっています。

というわけで、極として $k = k_0 + i\epsilon$ を含む経路 C の場合は留数定理より

$$
\begin{aligned}
-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{(k-k_0-i\epsilon)(k+k_0+i\epsilon)} &= -\int_C \frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{(k-k_0-i\epsilon)(k+k_0+i\epsilon)} \\
&= \int_C dk\ f(k) \\
&= 2\pi i \mathrm{Res}(f, k_0+i\epsilon) \\
&= 2\pi i \lim_{z\to|k_0|+i\epsilon}(z-k_0-i\epsilon)f(z) \\
&= -i \lim_{z\to k_0+i\epsilon}(z-k_0-i\epsilon)\frac{\exp[i(x'-x)z]}{(z-k_0-i\epsilon)(z+k_0+i\epsilon)} \\
&= -i \lim_{z\to k_0+i\epsilon}\frac{\exp[i(x'-x)z]}{k_0+i\epsilon+k_0+i\epsilon} \\
&= -i\frac{\exp[i(x'-x)(k_0+i\epsilon]}{2k_0+2i\epsilon} \\
&= -i\frac{\exp[i(x'-x)k_0]}{2k_0}
\end{aligned}
$$

極を避けるために加えた ϵ は最後に 0 に持って行っています。この結果は、$x' > x$ のときに対応します。

　同様にして $-k_0 - i\epsilon$ を含む経路 C_2 は (今度の場合は経路が時計回りになっているのでマイナスを加えます。反時計回りをプラスにとる)

$$
\begin{aligned}
&-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{(k-k_0-i\epsilon)(k+k_0+i\epsilon)} \\
&\quad= -\int_{C'} \frac{dk}{2\pi}\frac{\exp[i(x'-x)k]}{(k-k_0-i\epsilon)(k+k_0+i\epsilon)} \\
&\quad= \int_{C'} dk\ f(k) \\
&\quad= -2\pi i \mathrm{Res}(f, -k_0-i\epsilon) \\
&\quad= -2\pi i \lim_{z\to -k_0-i\epsilon}(z+k_0+i\epsilon)f(z) \\
&\quad= i \lim_{z\to -k_0-i\epsilon}(z+k_0+i\epsilon)\frac{\exp[i(x'-x)z]}{(z-k_0-i\epsilon)(z+k_0+i\epsilon)} \\
&\quad= i \lim_{z\to -k_0-i\epsilon}\frac{\exp[i(x'-x)z]}{z-k_0-i\epsilon} \\
&\quad= i\frac{\exp[i(x'-x)(-k_0-i\epsilon)]}{-2k_0-2i\epsilon} \\
&\quad= -i\frac{\exp[-i(x'-x)k_0]}{2k_0}
\end{aligned}
$$

今度は $x > x'$ の場合に対応します。

　というわけで、グリーン関数は

$$
G^{\pm}(x', x) = -i\frac{\exp[\pm i(x'-x)k_0]}{2k_0}
$$

となり、プラスが $x' > x$ (経路 C)、マイナスが $x > x'$ (経路 C') のときになります。このようにして求まったグリーン関数は散乱問題を扱うときに利用されます。

今度は時間依存している場合を見ていきます。ついでに 3 次元にします。具体的に示しませんが、上での話を 3 次元ベクトルにすればいいだけです。デルタ関数の関係を説明なしで使ってしまっています。

非同次でのシュレーディンガー方程式

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)\psi(\boldsymbol{x}, t) = f(\boldsymbol{x}, t) \tag{7}$$

の解は、グリーン関数 G によって

$$\psi(\boldsymbol{x}', t') = \psi_0(\boldsymbol{x}', t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3x\ G(\boldsymbol{x}', t'; \boldsymbol{x}, t)f(\boldsymbol{x}, t) \tag{8}$$

と与えられます。ψ_0 は同次での一般解です。G は $\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, t', t$ に依存し、$G(\boldsymbol{x}', t'; \boldsymbol{x}, t)$ が従う方程式は

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2)G(\boldsymbol{x}', t'; \boldsymbol{x}, t) = \delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x})\delta(t' - t) \tag{9}$$

となっています。デルタ関数は

$$\delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}) = \delta(x' - x)\delta(y' - y)\delta(z' - z)$$

と表記しています。(8) が解になっているのは、(7) に (8) を入れて (9) を使えば確かめられます。

ここでのグリーン関数は $\tau = t' - t$ に依存するとします。また、$(\boldsymbol{x}', t'; \boldsymbol{x}, t)$ と「;」で区切っていますが、他にも「|」で区切ったり、単純に並べて書かれたりもします。

グリーン関数を求めます。そのために、フーリエ変換を行います。関数 $F(t)$ のフリーエ変換を

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\ e^{-i\omega t}F(\omega)\ ,\ F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t}F(t)$$

と定義します。同じ F を使っていますがフーリエ変換前後で関数は変わります（はっきりさせるなら $F(t), \tilde{F}(\omega)$ のように区別すればいい)。この定義では、デルタ関数は

$$2\pi\delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\ e^{-i\omega t}$$

となります。

グリーン関数は $\tau = t' - t$ に依存するとしているので、$G(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, \tau)$ とします。フーリエ変換して

$$G(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}G(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, \omega) \tag{10}$$

これを (9) に入れると

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2)G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)=(i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t'-t)}G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t'-t)}(\hbar\omega+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2)G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)$$

このとき、$G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)$ が

$$(\hbar\omega+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2)G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)=\delta^3(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}) \tag{11}$$

なら

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t'-t)}(\hbar\omega+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2)G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)=\delta^3(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t'-t)}$$
$$=\delta^3(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\delta(t'-t)$$

となります。なので、$G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)$ は時間独立なシュレーディンガー方程式

$$(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\hbar\omega)\psi_0(\boldsymbol{x})=h(\boldsymbol{x})$$

に対応するグリーン関数です。というわけで、上での結果が使えます。余計な係数が出てこないように

$$\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}=\boldsymbol{\lambda}^2$$

とします。

∇^2 は 3 次元波数ベクトルの演算子 $-\hat{\boldsymbol{k}}^2$ なので、固有状態 $|\boldsymbol{k}\rangle$ によって

$$G(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)=\langle\boldsymbol{x}'|(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\boldsymbol{k}}^2+\hbar\omega)^{-1}|\boldsymbol{x}\rangle=-\int d^3k\frac{\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle}{\boldsymbol{\lambda}^2-\hbar\omega}$$

(6) のように $\hbar\omega$ に $\pm i\epsilon$ を加えれば $G^\pm(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)$ になるので

$$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)=-\int d^3k\frac{\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle}{\boldsymbol{\lambda}^2-(\hbar\omega+i\epsilon)} \tag{12a}$$
$$G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)=-\int d^3k\frac{\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle}{\boldsymbol{\lambda}^2-(\hbar\omega-i\epsilon)} \tag{12b}$$

これらを (6) に入れれば対応する $G^\pm(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\tau)$ が求まります。

$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)$ を求めます。(5) と (12a) から

$$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{-i\omega\tau}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})}\frac{1}{\hbar\omega-\boldsymbol{\lambda}^2+i\epsilon}$$

ω 積分を見てみると

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\hbar\omega-\boldsymbol{\lambda}^2+i\epsilon}&=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-\boldsymbol{\lambda}^2/\hbar+i\epsilon}\\&=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i(\omega'+\lambda^2/\hbar)\tau}\frac{1}{\omega'+i\epsilon}\qquad(\omega'=\omega-\boldsymbol{\lambda}^2/\hbar)\\&=\frac{1}{\hbar}e^{-i\lambda^2\tau/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}e^{-i\omega'\tau}\frac{1}{\omega'+i\epsilon}\end{aligned}$$

ϵ を 0 にすることを踏まえれば、階段関数 Θ の積分形

$$\Theta(\tau)=-\frac{1}{2i\pi}\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{e^{-iz\tau}}{z+i\epsilon}$$

そのものになっているので

$$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)=-\frac{2i\pi}{\hbar}e^{-i\lambda^2\tau/\hbar}\Theta(\tau)$$

階段関数は $\tau>0$ で $\Theta(\tau)=1$、$\tau<0$ で $\Theta(\tau)=0$ です。よって、$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)$ は

$$\begin{aligned}G^+(\boldsymbol{x}',t';\boldsymbol{x},t)=&\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\omega)\\=&-\frac{i}{\hbar}\Theta(t'-t)\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{-i\lambda^2\tau/\hbar}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})}\end{aligned}\tag{13}$$

となり、$t'>t$ のときに値を持ちます。つまり、$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)$ は遅延グリーン関数です。同様に、$G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)$ は先進グリーン関数と分かります。よって、非同次でのシュレーディンガー方程式の解は先進、遅延グリーン関数で書けます。また、この積分はガウス積分の形に持っていけば実行できます (「経路積分～自由粒子～」参照)。

グリーン関数による別の関係も求めます。(12a),(12b) の差を取ると

$$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)-G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)=-\int d^3k\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle\left(\frac{1}{\boldsymbol{\lambda}^2-\hbar\omega-i\epsilon}-\frac{1}{\boldsymbol{\lambda}^2-\hbar\omega+i\epsilon}\right)$$

右辺の括弧内は

$$\lim_{y\to0}\left(\frac{1}{x-iy}-\frac{1}{x+iy}\right)=2i\pi\delta(x)$$

という関係から

$$\begin{aligned}G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)-G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)=&-2i\pi\int d^3k\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle\delta(\boldsymbol{\lambda}^2-\hbar\omega)\\=&-\frac{2i\pi}{\hbar}\int d^3k\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle\delta\left(\frac{\boldsymbol{\lambda}^2}{\hbar}-\omega\right)\qquad\left(\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)\right)\end{aligned}$$

そうすると、$G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\tau)$ と $G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\tau)$ の差は

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\tau) &= G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\tau) - G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\tau) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega) - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}(G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega) - G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x};\omega)) \\
&= -\frac{2i\pi}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\int d^3k\ e^{-i\omega\tau}\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle\delta(\frac{\boldsymbol{\lambda}^2}{\hbar}-\omega) \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int d^3k\ e^{-i\boldsymbol{\lambda}^2\tau/\hbar}\langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int d^3k\ \langle\boldsymbol{x}'|e^{-i\boldsymbol{\lambda}^2\tau/\hbar}|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{\lambda}$ は $|\boldsymbol{k}\rangle$ に作用する演算子としては

$$
\hat{\boldsymbol{\lambda}}^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\hat{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}
$$

となっているので、$\hat{\boldsymbol{\lambda}}^2$ はハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ として $|\boldsymbol{k}\rangle$ に作用しています。よって

$$
g(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau) = -\frac{i}{\hbar}\int d^3k\ \langle\boldsymbol{x}'|e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{x}\rangle
$$

これから、$\boldsymbol{k}$ の完全性を外すことで

$$
\hat{g}(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\int d^3k\ e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}| = -\frac{i}{\hbar}e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}
$$

となり、時間発展演算子になっているのが分かります。また、$g(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)$ は $\tau>0$ なら遅延グリーン関数 G^+、$\tau<0$ なら先進グリーン関数 $-G^-$ になるので

$$
\Theta(\tau)g(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau) = G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)\ ,\ \Theta(-\tau)g(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau) = -G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)
$$

となっています。実際に、(13) のように $G^\pm(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)$ は階段関数を持っているので、

$$
\Theta(\tau)(G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau) - G^-(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)) = G^+(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)
$$

これをはっきりさせるために、

$$
G^\pm(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)\ \Rightarrow\ \Theta(\pm\tau)G^\pm(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},\tau)
$$

のように、階段関数を外に出して定義することもあります。

時間発展演算子として使うと

$$\begin{aligned}
|\phi;t'\rangle &= i\hbar\hat{g}(t'-t)|\phi;t\rangle \\
\langle\boldsymbol{x}'|\phi;t'\rangle &= i\hbar\langle\boldsymbol{x}'|\hat{g}(t'-t)|\phi;t\rangle \\
\phi(\boldsymbol{x}',t') &= i\hbar\int d^3x\langle\boldsymbol{x}'|\hat{g}(t'-t)|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\phi;t\rangle \\
&= i\hbar\int d^3x\ g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\tau)\phi(\boldsymbol{x},t)
\end{aligned}$$

よって、先進、遅延グリーン関数の差 $g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\tau)$ は $\phi(\boldsymbol{x},t)$ から $\phi(\boldsymbol{x}',t')$ への変換部分になります。これは、時間依存するシュレーディンガー方程式

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H})\phi(\boldsymbol{x},t)=0$$

での波動関数 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ の時間発展を $g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\tau)$ が媒介することを表しています。また、$g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\tau)$ はファインマン核に対応しています (「経路積分」参照)。