グリーン関数とスペクトル関数

「有限温度のグリーン関数」での話に、いくつか情報を加えます

　温度、遅延、先進グリーン関数の定義はボソンでは

$$
\begin{aligned}
&D_\beta(\tau,\tau',\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \langle T[\phi(\tau,\boldsymbol{x})\phi^\dagger(\tau',\boldsymbol{y})]\rangle_\beta \\
&D_R(x,y) = i\theta(x_0-y_0)(D^>(x,y)-D^<(x,y)) \\
&D_A(x,y) = -i\theta(y_0-x_0)(D^>(x,y)-D^<(x,y)) \\
&D^>(x,y) = \langle\phi(x)\phi^\dagger(y)\rangle_\beta\ ,\ D^> = \langle\phi^\dagger(x)\phi(y)\rangle_\beta
\end{aligned}
$$

T は虚時間 τ に対する時間順序積、θ は階段関数です。フェルミオンでは

$$
\begin{aligned}
&S_\beta(\tau,\tau',\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \langle T[\psi(\tau,\boldsymbol{x})\overline{\psi}(\tau',\boldsymbol{y})]\rangle_\beta \\
&S_R(x,y) = i\theta(x_0-y_0)(S^>(x,y)-S^<(x,y)) \\
&S_A(x,y) = -i\theta(y_0-x_0)(S^>(x,y)-S^<(x,y)) \\
&S^>(x,y) = \langle\psi(x)\overline{\psi}(y)\rangle_\beta\ ,\ S^<(x,y) = -\langle\overline{\psi}(x)\psi(y)\rangle_\beta
\end{aligned}
$$

ボソン、フェルミオン両方で同じ関係を持っている場合は共通の記号として G を使います。これらによってスペクトル関数は運動量表示で

$$
\rho(p) = G^>(p) - G^<(p)
$$

と与えられ、各グリーン関数は

$$
\begin{aligned}
&G_\beta(i\omega_n,\boldsymbol{p}) = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(k_0,\boldsymbol{k})}{i\omega_n-k_0}dk_0 \\
&G_R(p_0,\boldsymbol{p}) = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(k_0,\boldsymbol{k})}{p_0-k_0+i\epsilon}dk_0 = G_\beta(i\omega_n,\boldsymbol{p})|_{i\omega_n=p_0+i\epsilon} \\
&G_A(p_0,\boldsymbol{p}) = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(k_0,\boldsymbol{k})}{p_0-k_0-i\epsilon}dk_0 = G_\beta(i\omega_n,\boldsymbol{p})|_{i\omega_n=p_0-i\epsilon}
\end{aligned}
$$

これらは化学ポテンシャル μ があっても成立しています。これからスペクトル関数が実数なら $G_R(p)=G_A^*(p)$ となります。また、表記上は区別していませんがフェルミオンではスピノール成分による行列です。

　スペクトル関数 $\rho(k)$ を実数とすれば、遅延、先進グリーン関数によって

$$
\rho(p) = -i(G_R(p)-G_A(p)) = -i(G_R(p)-G_R^*(p)) = 2\mathrm{Im}G_R(p) = -2\mathrm{Im}G_A(p)
$$

虚部に対応することは、場の量子論の「伝播関数について」で示した主値による関係 (P が主値を表します)

$$\frac{1}{x-y\pm i\epsilon}=P\frac{1}{x-y}\mp i\pi\delta(x-y)$$

をスペクトル関数の関係に使った

$$\begin{aligned}
G_R(p_0)=&-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk_0\frac{\rho(k_0)}{p_0-k_0+i\epsilon}\\
=&-\frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dk_0\frac{\rho(k_0)}{p_0-k_0}+\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dk_0\rho(k_0)\delta(p_0-k_0)\\
=&-\frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dk_0\frac{\rho(k_0)}{p_0-k_0}+\frac{i}{2}\rho(p_0)
\end{aligned}$$

これからもわかり、ρ が実数なら G_R の虚部になっています。

遅延、先進グリーン関数がスペクトル関数で表現でき、スペクトル関数は遅延、先進グリーン関数の虚部に対応していることから、遅延、先進グリーン関数の実部と虚部の間には関係性があることが予想できます。それを見ます。遅延グリーン関数に階段関数をかけてやると

$$\begin{aligned}
G_R(x,y)&=i\theta(x_0-y_0)(G^>(x,y)-G^<(x,y))\\
\theta(x_0-y_0)G_R(x,y)&=i\theta(x_0-y_0)(G^>(x,y)-G^<(x,y))\\
\theta(x_0-y_0)G_R(x,y)&=G_R(x,y)
\end{aligned}$$

これは遅延グリーン関数は $x_0>y_0$ で定義されているので当たり前の話です。グリーン関数に対するフーリエ変換を運動量保存 (並進不変性) が成立しているとして単純に

$$G_R(p)=\int d^4xd^4yG_R(x,y)e^{ip(x-y)}$$

と定義します (デルタ関数を残した形でも同じ)。そうすると

$$\begin{aligned}
G_R(x,y)=&\ \theta(x_0-y_0)G_R(x,y)\\
\int d^4xd^4yG_R(x,y)e^{ip(x-y)}=&-\frac{1}{2i\pi}\lim_{\epsilon\to0}\int d^4xd^4y\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{e^{-iz(x_0-y_0)}}{z+i\epsilon}G_R(x,y)e^{ip(x-y)}\\
G_R(p)=&-\frac{1}{2i\pi}\lim_{\epsilon\to0}\int d^4xd^4y\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{e^{-iz(x_0-y_0)}}{z+i\epsilon}G_R(x,y)e^{ip_0(x_0-y_0)}e^{-i\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\\
=&-\frac{1}{2i\pi}\lim_{\epsilon\to0}\int d^4xd^4y\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{z+i\epsilon}G_R(x,y)e^{i(p_0-z)(x_0-y_0)}e^{-i\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\\
=&-\frac{1}{2i\pi}\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\infty}^{\infty}dz'\frac{1}{p_0-z'+i\epsilon}\int d^4xd^4yG_R(x,y)e^{iz'(x_0-y_0)}e^{-i\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\\
=&\ \frac{i}{2\pi}\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{p_0-z+i\epsilon}G_R(z,\boldsymbol{p})
\end{aligned}$$

階段関数の

$$\theta(x_0-y_0)=-\frac{1}{2i\pi}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{e^{-iz(x_0-y_0)}}{z+i\epsilon}$$

を使っています。さらに主値を使った関係

$$\frac{1}{p_0-z+i\epsilon}=P\frac{1}{p_0-z}-i\pi\delta(p_0-z)$$

を使うと

$$\begin{aligned}
G_R(p)&=\frac{i}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{p_0-z}G_R(z,\boldsymbol{p})+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dz\delta(p_0-z)G_R(z,\boldsymbol{p})\\
&=\frac{i}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{p_0-z}G_R(z,\boldsymbol{p})+\frac{1}{2}G_R(p_0,\boldsymbol{p})\\
G_R(p)&=\frac{i}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{p_0-z}G_R(z,\boldsymbol{p})
\end{aligned}$$

となるので、$G_R=\mathrm{Re}G_R+i\mathrm{Im}G_R$ として実部と虚部に分けると

$$\mathrm{Re}G_R(p)=\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{z-p_0}\mathrm{Im}G_R(z,\boldsymbol{p})$$

$$\mathrm{Im}G_R(p)=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{z-p_0}\mathrm{Re}G_R(z,\boldsymbol{p})$$

となっていることが分かります。先進グリーン関数では符号が反転して

$$\mathrm{Re}G_A(p)=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{z-p_0}\mathrm{Im}G_A(z,\boldsymbol{p})$$

$$\mathrm{Im}G_A(p)=\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{1}{z-p_0}\mathrm{Re}G_A(z,\boldsymbol{p})$$

これらをクラマース・クローニッヒの関係 (Kramers-Kronig relations) もしくは分散式と呼びます。この関係式は遅延、先進グリーン関数の因果律 (時間順序) を反映して出てきていることが特徴です。

同じ結果は遅延、先進グリーン関数の解析性からも導けます (場の量子論の「伝播関数について」も参照)。遅延グリーン関数は複素平面の上半面で解析的 (極がない) なので

$$\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{G_R(z,\boldsymbol{p})}{p_0-z-i\epsilon}=0$$

となっています。これは上半円をつけた経路内に極がいないためです (ジョルダンの補題から半円の寄与は 0)。変形すると

$$P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{G_R(z,\boldsymbol{p})}{p_0-z}+i\pi G_R(p_0,\boldsymbol{p})=0$$

$$G_R(p)=\frac{i}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{G_R(z,\boldsymbol{p})}{p_0-z}$$

先進グリーン関数では

$$G_A(p)=-\frac{i}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}dz\frac{G_A(z,\boldsymbol{p})}{p_0-z}$$

となり、これらもクラマース・クローニッヒの関係と呼ばれます。というより、こっちの形から実部と虚部の関係性がでてきます。

遅延グリーン関数の極について見てみます。相対論的な場合では粒子と反粒子による 2 つの極がいるために後で分離しなければいけないので、最初から粒子部分だけを見ます。なので、遅延グリーン関数の粒子部分にあたる形を

$$G_R^+(z,\boldsymbol{p})=\frac{-1}{z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\Sigma_R^+(z,\boldsymbol{p})}$$

とします (非相対論的な場合での遅延グリーン関数の形)。この z は G_R^+ は z の複素平面における上半面で解析的であることを意味しているとして、極をよける $i\epsilon$ を省いています。Σ_R^+ を実部と虚部に分けて変形していくと

$$\begin{aligned}G_R^+(z,\boldsymbol{p})&=\frac{-1}{z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-(\mathrm{Re}\Sigma_R^++i\mathrm{Im}\Sigma_R^+)}\\&=-\frac{z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\mathrm{Re}\Sigma_R^++\mathrm{Im}\Sigma_R^+}{(z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\mathrm{Re}\Sigma_R^+)^2+(\mathrm{Im}\Sigma_R^+)^2}\end{aligned}$$

これによってスペクトル関数は

$$\rho_+=2\mathrm{Im}G_R^+(z,\boldsymbol{p})=-\frac{2\mathrm{Im}\Sigma_R^+}{(z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\mathrm{Re}\Sigma_R^+)^2+(\mathrm{Im}\Sigma_R^+)^2}$$

と書けます。この形を見てみるとコーシー分布

$$f=\frac{1}{\pi}\frac{\gamma}{(x-x_0)^2+\gamma^2}$$

の形をしていることが分かります ($1/\pi$ が出てくるようしたければ ρ をそのように定義しなおせばいい)。$x=x_0$ で最大値を持ち、γ がその半値幅を表します。なので、スペクトル関数は $p_0^2=\omega^2+\mathrm{Re}\Sigma$ のところで最大値を持ち、$\mathrm{Im}\Sigma$ による半値幅を持っていることになります。というわけで、相互作用があるときには半値幅 $\mathrm{Im}\Sigma$ を持った山となります ($\Sigma\to 0$ でデルタ関数に近づく)。このように幅を持った粒子の状態を準粒子と定義したりします。また、エネルギーに対する半値幅はエネルギーの不確定性とみなせます。エネルギーの不確定さ (ばらつき)ΔE は不確定性原理より、粒子が安定して存在している時間 Δt と

$$\Delta E\Delta t\geq\frac{\hbar}{2}$$

という関係を持つので、自己エネルギー Σ_R の虚部は粒子の寿命（崩壊率）を表します。また自由粒子でのスペクトル関数は例えばボソンでは

$$\rho(p)=2\pi\epsilon(p_0)\delta(p_0^2-\boldsymbol{p}^2-m^2)$$

となっており、これは $\mathrm{Im}\Sigma_R=0$ であるために、スペクトル関数のピークに幅がないことに対応し、安定粒子であることが分かります。

遅延グリーン関数の極についてみてみます。極は

$$z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\Sigma_R^+(z,\boldsymbol{p})=0$$

によって与えられます。なので、極の位置 z_0 は

$$z_0+\mu-E_{\boldsymbol{p}}=\Sigma_R^+(z_0,\boldsymbol{p})$$

となっています。この極周りで自己エネルギーを展開した

$$\Sigma_R^+(z,\boldsymbol{p})=\Sigma_R^+(z_0,\boldsymbol{p})+\frac{\partial\Sigma_R^+}{\partial z}|_{z=z_0}(z-z_0)+\cdots$$

これを遅延グリーン関数に入れると

$$\begin{aligned}
G_R^+(z,\boldsymbol{p})=&\ -(z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\Sigma_R^+(z,\boldsymbol{p}))^{-1}\\
\simeq&\ -\Big(z+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\Sigma_R^+(z_0,\boldsymbol{p})-\frac{\partial\Sigma_R^+}{\partial z}|_{z=z_0}(z-z_0)\Big)^{-1}\\
=&\ -\Big(z-z_0-\frac{\partial\Sigma_R^+}{\partial z}|_{z=z_0}(z-z_0)\Big)^{-1}\\
=&\ -\frac{1}{z-z_0}\Big(1-\frac{\partial\Sigma_R^+}{\partial z}|_{z=z_0}\Big)^{-1}
\end{aligned}$$

と書くことができます。$-(1-\partial\Sigma_R^+/\partial z|_{z=z_0})^{-1}$ が G_R^+ の留数になっています。

最後に $\mathrm{Im}\Sigma_R^+\to 0$ でのスペクトル関数の形を出しておきます。スペクトル関数のコーシー分布の形

$$\rho_+(p)=-\frac{2\mathrm{Im}\Sigma_R^+}{(p_0+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\mathrm{Re}\Sigma_R^+)^2+(\mathrm{Im}\Sigma_R^+)^2}$$

において、$\mathrm{Im}\Sigma_R^+\to 0$ とするとデルタ関数

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{\gamma\to 0}\frac{\gamma}{(x-x_0)^2+\gamma^2}$$

に対応するので

$$-\frac{1}{2\pi}\rho_+(p)=\delta(p_0+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\mathrm{Re}\Sigma_R^+)$$

そしてデルタ関数内を p_0 の関数だとしてデルタ関数の関係

$$\delta(g(x))=\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{|\partial g(x)/\partial x|_{x=x_i}}\delta(x-x_i)\qquad(g(x_i)=0)$$

を使うことで

$$\rho_+(p)=-2\pi\sum_{i=1}^{n}(1-\frac{\partial\mathrm{Re}\Sigma_R^+}{\partial p_0})^{-1}_{|p_0=z_i}\delta(p_0-z_i)$$

となります。z_i は

$$z_i+\mu-E_{\boldsymbol{p}}-\mathrm{Re}\Sigma_R^+(z_i,\boldsymbol{p})=0$$

を満たすもの、つまり虚部がないときの遅延グリーン関数の極です。なので、虚部がないときのスペクトル関数は遅延グリーン関数の極の位置に鋭いピークを持ちます。自由粒子なら $p_0=E_{\boldsymbol{p}}$ の地点にピークが出ます (反粒子なら $p_0=-E_{\boldsymbol{p}}$)。

・補足

コーシー分布が出てくる話を見てみます。外力と摩擦があるときの 1 次元のバネの運動方程式

$$m\frac{d^2x}{dt^2}+\gamma\frac{dx}{dt}+kx=F$$

を持ち出します。γ が摩擦係数、k がバネ定数です。外力 F は粒子に対して何かしらの力を発生させる A という量によって $F=\eta A$ と作用しているとします (例えば A が電場なら η は電荷)。そして、このとき A はある量 $\mu=\eta x$ を引き起こすとします。言い換えると、外力のないときのバネの運動にある量 A を作用させたとき、μ が出てくるということです。これによってバネの運動方程式は

$$m\frac{d^2\mu}{dt^2}+\gamma\frac{d\mu}{dt}+k\mu=\eta^2A$$

A は平面波だとして

$$A=A_0e^{i\omega t}$$

反応して出てくる μ も平面波によって

$$\mu=\mu_0e^{i\omega t}$$

と出てくるとします。そうすると運動方程式は

$$-m\mu_0\omega^2 e^{i\omega t} + i\gamma\omega\mu_0 e^{i\omega t} + k\mu_0 e^{i\omega t} = \eta^2 A_0 e^{i\omega t}$$
$$(-m\omega^2 + i\gamma\omega + k)\mu_0 = \eta^2 A_0$$
$$\frac{\mu_0}{A_0} = \frac{\eta^2}{k - m\omega^2 + i\gamma\omega} \tag{1}$$

となります。k を $k = m\omega_0^2$ とすれば

$$\frac{\mu_0}{A_0} = \frac{\eta^2}{m[(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega/m]}$$

コーシー分布の形に似てきているのが分かると思います。完全に一致させるためにこの式が $\gamma\omega/m$ が小さいとき $\omega \sim \omega_0$ で発散することを利用して、この発散地点周りで $(\omega_0^2 - \omega^2)$ を展開し

$$(\omega_0^2 - \omega^2) = (\omega_0 - \omega)(\omega_0 + \omega) \simeq -(\omega_0 + \omega)|_{\omega=\omega_0}(\omega - \omega_0) = 2\omega_0(\omega_0 - \omega)$$

これを入れなおすと

$$\begin{aligned}\frac{\mu_0}{A_0}|_{\omega=\omega_0} &\simeq \frac{\eta^2}{m[2\omega_0(\omega_0 - \omega) + i\gamma\omega_0/m]} \\ &= \frac{\eta^2}{2m\omega_0[(\omega_0 - \omega) + i\gamma/2m]} \\ &= \frac{\eta^2((\omega_0 - \omega) - i\gamma/2m)}{2m\omega_0[(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2/4m^2]}\end{aligned}$$

よって虚部は

$$\mathrm{Im}\frac{\mu_0}{A_0}|_{\omega=\omega_0} = -\frac{\eta^2}{2m\omega_0}\frac{\gamma/2m}{[(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2/4m^2]}$$

となり、コーシー分布になります。

バネの運動方程式を使っている以外は抽象的な話しかしていないので何がなんなのか分かりづらいですが、この話は応答理論における非常に単純なモデルです。応答理論であるのは、時間に依存する入力 $A(t)$ によって系が応答 $\mu(t)$ するという問題を扱っているからです。特に今の場合では平面波を使っていることから分かるように、A, μ は重ね合わせが可能で、尚且つ並進不変な関係 (定常性、$A(t) \Rightarrow \mu(t)$ なら $A(t-t') \Rightarrow \mu(t-t')$) を持っています。このような系を線形系と言い、この手の話を線形応答理論と言います。

物性等で周波数に対するスペクトルなんかがこの分布のときローレンツ (Lorentz) 型の共鳴スペクトルと呼びます。共鳴といっているのは $\omega \sim \omega_0$ で発散する (急激に大きくなる) からです。なので ω_0 を共鳴周波数とか言います。この分布を出している平面波の係数の比 μ_0/A_0 （応答 / 入力）は応答関数と呼ばれ、応答関数の虚部を吸収曲線と呼んだりもします。大雑把な話ですが、グリーン関数がインパルス型の応答関数に対応していることを踏まえれば、遅延グリーン関数の虚部がコーシー分布の形になっていることとの対応がなんとなく分かると思います。また、名称なのでどうでもいい話ですが、コーシー分布は、ローレンツ分布、ブライト・ウィグナー分布と呼ばれたりします。

ついでに、(1) において $k \gg m\omega^2$ とすると

$$\frac{\mu_0}{A_0} = \frac{\eta^2}{k + i\gamma\omega} = \frac{1}{k}\frac{\eta^2}{1 + i\gamma\omega/k} = \frac{\eta^2}{k}\frac{1 - i\gamma\omega/k}{1 + (\gamma\omega/k)^2}$$

このときの虚部はコーシー分布ほど鋭いピークを持っていなく、デバイ (Debye) 型の緩和スペクトルと呼ばれます。

有限温度の場の理論では線形応答理論 (久保公式) が出てくることからも分かるように、非平衡系へのアプローチも存在し、その基本となる話の簡単な例としてついでにしておきました。