

Krótkie wprowadzenie do funkcji Greena w fizyce: Pojęcie jednocząstkowej funkcji Greena

Mariusz Adamski

1 Twierdzenie Greena

Zgodnie z twierdzeniem Gaussa¹

$$\oiint_S \vec{F} \cdot d\vec{S} = \iiint_V d^3r' \nabla' \cdot \vec{F}(\vec{r}'),$$

gdzie V jest objętością zamkniętą wewnątrz powierzchni S . Jeśli wybrać

$$\vec{F} = U\nabla'G - G\nabla'U,$$

dostaniemy:

$$\oiint_S (U\nabla'G - G\nabla'U) \cdot d\vec{S} = \iiint_V d^3r' (U\nabla'^2G - G\nabla'^2U),$$

co jest treścią twierdzenia Greena.

Jeśli $\nabla'^2U(\vec{r}') = f(\vec{r}')$ oraz $\nabla'^2G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ to z twierdzenia Greena

$$U(\vec{r}) = \iiint_V d^3r' f(\vec{r}')G(\vec{r} - \vec{r}') + \oiint_S (U\nabla'G - G\nabla'U).$$

Druga całka znika, jeśli funkcje U i G są równe 0 na powierzchni S . Funkcja G jest nazywana funkcją Greena.

Tożsamość ta została uogólniona dla dowolnych operatorów różniczkowych \hat{D} , tak że rozwiązaniem każdego równania postaci

$$\hat{D}U(\vec{r}) = f(\vec{r})$$

jest

$$U(\vec{r}) = \iiint_V d^3r' f(\vec{r}')G(\vec{r} - \vec{r}')$$

o ile $\hat{D}G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ i funkcje U i G znikają na brzegach obszaru całkowania.

2 Funkcja Greena cząstki swobodnej

Równanie Schrödingera cząstki swobodnej

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0$$

na mocy powyższych rozważań prowadzi do

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i \frac{\partial}{\partial t} \right) G(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t').$$

Wprowadzając transformatę Fouriera funkcji G

$$G(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = \iiint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} G(\vec{k}; t - t')$$

¹Oryginalne rozumowanie George'a Greena biegło w istocie nieco innym torem, gdyż prawdopodobnie nie znał on twierdzenia Gaussa. Przedstawione rozumowanie ma na celu pokazanie ekwiwalentności twierdzeń Greena i Gaussa (które jest zapewne lepiej znane).

możemy powyższe równanie przepisać jako

$$\iiint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\bar{k}(\bar{r}-\bar{r}')} \left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\frac{\partial}{\partial t} \right) G(\bar{k}; t-t') = \delta(\bar{r}-\bar{r}')\delta(t-t').$$

Biorąc teraz transformatę Fouriera obu stron równania dostaniemy

$$\left(-\varepsilon_k + i\frac{\partial}{\partial t} \right) G(\bar{k}; t-t') = \delta(t-t').$$

Równanie to spełniają dwie funkcje

$$\begin{aligned} G_0^R(k; t-t') &= i\theta(t-t')e^{-i\varepsilon_k(t-t')} \quad (\text{retardowana}), \\ G_0^A(k; t-t') &= -i\theta(t'-t)e^{-i\varepsilon_k(t-t')} \quad (\text{advansowana}). \end{aligned}$$

3 Funkcja Greena cząstki w polu sił zewnętrznych

Wprowadzając zaburzenie w postaci potencjału $V(\bar{r})$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V(\bar{r}) + i\frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\bar{r}, t) = 0$$

oraz jego transformatę Fouriera

$$V(\bar{r}) = \iiint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\bar{k}\bar{r}} V(\bar{k}),$$

dostajemy

$$\begin{aligned} \iiint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\bar{k}\bar{r}} \left(-\varepsilon_k - V(\bar{k}) + i\frac{\partial}{\partial t} \right) G(\bar{k}; t-t') &= \delta(\bar{r}-\bar{r}')\delta(t-t') \\ \left(-\varepsilon_k - V(\bar{k}) + i\frac{\partial}{\partial t} \right) G(\bar{k}; t-t') &= \delta(t-t'). \end{aligned}$$

Po odjęciu stronami równania $(-\varepsilon_k + i\frac{\partial}{\partial t})G_0(\bar{k}; t-t') = \delta(t-t')$ otrzymamy

$$\left(-\varepsilon_k + i\frac{\partial}{\partial t} \right) (G(\bar{k}; t-t') - G_0(\bar{k}; t-t')) = V(\bar{k})G(\bar{k}; t-t')$$

Oczywiście funkcją Greena tego równania jest funkcja G_0 , więc na mocy twierdzenia Greena

$$G(\bar{k}; t-t') - G_0(\bar{k}; t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_0(\bar{k}; t-t'-t'')V(\bar{k})G(\bar{k}; t'');$$

podstawiając $t'' := t'' - t'$

$$G(\bar{k}; t-t') = G_0(\bar{k}; t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_0(\bar{k}; t-t'')V(\bar{k})G(\bar{k}; t''-t'),$$

co jest równaniem typu Dysona².

Iterując to równanie dostajemy perturbacyjne rozwinięcie funkcji G :

$$\begin{aligned} G(\bar{k}; t-t') &= G_0(\bar{k}; t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_0(\bar{k}; t-t'')V(\bar{k})G_0(\bar{k}; t''-t') \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \int_{-\infty}^{\infty} dt''' G_0(\bar{k}; t-t'')V(\bar{k})G_0(\bar{k}; t''-t''')V(\bar{k})G_0(\bar{k}; t'''-t') + \dots \end{aligned}$$

²Gdyby tylko utożsamić transformatę Fouriera potencjału $V(\bar{k})$ z częścią energii własnej (*self-energy part*).