ввести сразу в их энергетические показатели экспонент фактор $\mp i\delta$ (δ положительно, $\lim \delta \to 0$):

$$G_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \mp i \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}_1)\,\varphi_n^*(\mathbf{r}_2)\,\theta(\pm t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E_n \mp i\delta)\,t\right]. \quad (\text{П.37})$$

Соответственно переходу от (П.23) к (П.21) можно указать для $G_\pm$ фурье-образ относительно времени

$$G_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \hbar \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r}_1)\,\varphi_n^*(\mathbf{r}_2)}{\hbar\omega - E_n \pm i\delta}. \quad (\text{П.38})$$

Для дальнейшего обсуждения этой функции вводим в G коэффициент $\hbar$ и пишем $E = \hbar\omega$ вместо ω:

$$G_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r}_1)\,\varphi_n^*(\mathbf{r}_2)}{E - E_n \pm i\delta}. \quad (\text{П.39})$$

В (П.37) и (П.39) проявляет себя взаимосвязь определенных здесь функций Грина с функциями Грина, известными по теории дифференциальных уравнений. Как известно, там дифференциальному оператору $L(x)$ посредством соотношения $L(x)G(x, \xi) = \delta(x - \xi)$ сопоставляется функция Грина $G(x, \xi)$. $G(x, \xi)$ дает возможность отыскания частного решения неоднородного дифференциального уравнения $L(x)\varphi(x) = V(x)$ как $\varphi(x) = \int G(x, \xi)\,V(\xi)\,d\xi$, что легко проверяется подстановкой.

Соответствующие соотношения следуют из (П.37) и (П.39) с помощью равенств

$$\frac{d}{dt}\,\theta(t) = \delta(t) \quad \text{и} \quad \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}_1)\,\varphi_n^*(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (\text{П.40})$$

Получаем

$$\left[-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}_1) \pm i\delta\right] G_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \hbar\,\delta(t)\,\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (\text{П.41})$$

и

$$[E - H(\mathbf{r}_1) \pm i\delta]\,G_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, E) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (\text{П.42})$$

Таким образом, с точностью до несущественного множителя $\hbar$ в пределе $\delta \to 0$ $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ является функцией Грина временнóго уравнения Шредингера, а $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ или $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, E)$ — не зависящего от времени уравнения Шредингера системы без взаимодействия.

Для систем с взаимодействием такая взаимосвязь между определениями (П.7) и (П.41) не дается.

Функция Грина $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, E)$ содержит в себе, с другой стороны, многочисленную информацию относительно рассматриваемой системы. Из (П.39) понятно, что ее полюса дают собственные значения E_n уравнения Шредингера (П.34). К этому мы вернемся в дальнейшем.

В предшествующих главах мы вывели из зонной модели такие физически важные величины, как плотность состояний, вероятность перехода между состояниями и пр. Функция Грина позволяет определить эти параметры также напрямую без окольного пути через зонную модель. Это важно, прежде всего, тогда, когда, как в случае неупорядоченных фаз, отказывается служить схема зонной модели.