数理解析研究所講究録
130巻 1971年 176-184

格子グリーン関数の適用例

岡大 理　萬成 勲

§1. 序

格子グリーン関数，或はワトソン積分の拡張型を次式で定義する。

$$(1)\quad I_{lmn}(\mu)=\frac{1}{\pi^3}\iiint_0^{\pi}\frac{\cos lx\cdot\cos my\cdot\cos nz}{\frac{1}{\mu}-\omega(x,y,z)}\,dx\,dy\,dz$$

ただし，ω は次式で与えられるものとする。

$$(2)\quad \omega=(\cos x+\cos y+\cos z)/3 \qquad (\mathrm{SC})$$

$$=\cos x\cdot\cos y\cdot\cos z \qquad (\mathrm{BCC})$$

$$=(\cos x\cdot\cos y+\cos y\cdot\cos z+\cos z\cdot\cos x)/3 \qquad (\mathrm{FCC})$$

この関数 $I_{lmn}(\mu)$ は，一般に格子構造を持つ系の議論に

於いてあらわれるものであり，したがってその適用例は多方面にわたっているが，ここでは，主として物性物理学の分野における応用を中心としてのべることにする。

最初，この種の積分を扱ったのは G. N. Watson (1939) であり，単純立方格子（SC），体心立方格子（BCC），面心立方格子（FCC）について，$I_{000}(1)$ を詳細に検討して，それらが第一種完全楕円積分を用いてあらわされることを示した[1]。これが，所謂ワトソン積分である。Maradudin は，BCC について，$I_{000}(\mu)$，$(0 \leq \mu \leq 1)$ を求め，それが第一種完全楕円積分の平方を含む表式であらわされることを示し[2]，岩田は FCC について $I_{000}(\mu)$，$(-3<\mu<0,\ 0 \leq \mu \leq 1)$ が第一種完全楕円積分の積の形にあらわされることを示した[3]。これらの表式は，さらに，守田，堀口等により，バンド内の領域に解析接続され得ることが示された[4]。なお，SC についてはこの種の簡単な表式は得られておらず，第一種完全楕円積分を含む一重積分の形の表式等が用いられている現状である。

現在までのところ，格子グリーン関数の数表はいくつか作成されており，その主なるものをあげると次のようになる。便宜上，バンドの内，外で分類しておく。最後の数字は文献番号を示す。

1) バンド外

$I_{000}(\mu)$	SC	Tikson	5)
$I_{lmn}(\mu;\alpha)$	SC	Maradudin et al.	2)
$I_{000}(\mu)$, $\partial I_{000}/\partial\mu$	SC, BCC, FCC	萬成，川端	6)
$I_{lmn}(\mu)$	SC	川部，萬成	7)

2) バンド内

$\mathrm{Im}\, I_{000}(\mu)$	SC, BCC, FCC	Jelitto	8)

3) バンド内，外

$I_{000}(\mu)$	SC, BCC, FCC	守田，堀口	4)

なお，Maradudin 等の数表の一部で精度が二桁位のところがあるので，使用する際注意が必要である。

§2. 適用例

若干の例をあげて，格子グリーン関数の適用例についてのべることにする。

〔1〕 不純物を含む結晶の格子振動における局所モード。

質量 M の原子から成る単純立方格子型結晶において，不純物原子（質量 $M' = (1-\varepsilon)M$ ）が１個，置換型で入った場合，不純物原子近傍の局所モードのあるものは次式で与えられる。

(3)
$$\frac{\omega}{\omega_0} = \sqrt{\frac{1+\mu}{2\mu}}$$
$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{1+\mu}{\mu} I_{000}(\mu)$$

これより，例えば，局所モードの出現条件を得る。

(4) $$\varepsilon \geq \frac{1}{2 I_{000}(1)} = 0.3297\cdots$$

［２］ 不純物スピンを持つ，各種磁性体における，スピン波の局所モード。

問題の内容は本質的には［１］と同等である。

［３］ 第二種相転移点近傍の性質。

この問題を，げんみつに扱うことは困難であるが，適当な近似解法を行なうと，格子グリーン関数があらわれる。AB 合金の order－disorder の問題，磁性体等における相転移が考

えられる。例えば，強磁性体を二時間温度グリーン関数法で扱うと，ある近似のもとで，転移点 T_c に対して次式をうる。

$$(5) \qquad 3k_BT_c = 2Jz\,S(S+1)\,/\,I_{000}(1)$$

反強磁性体の帯磁率の異方性は次のように与えられる。[9]

$$(6) \qquad \chi_{\parallel} - \chi_{\perp} = \frac{N\mu^2}{3k_BT}\,\frac{3}{5}\,\frac{D}{k_BT}\left\{1 + \frac{\alpha^2}{(1+\alpha)^2 I^2} - \frac{\alpha^2 I'}{I^2}\right\}$$

$$I \equiv I_{000}(\alpha), \qquad I' = \partial I_{000}(\alpha)/\partial\alpha$$

$$\alpha = z\,L\,(A/k_BT)$$

L ：ランジェバン関数

A ：交かん積分

D ：一軸性異方性定数

強磁性体，反強磁性体における常磁性共鳴吸収線の議論において，$I_{000}(\mu)$，$\partial I_{000}/\partial\mu$ があらわれる。[10] 一方，層構造

をもつ磁性体の問題では，次のような異方性を含む積分が必要となる。

(7) $$I_{lmn}(\mu;\alpha)=\frac{1}{\pi^3}\iiint_0^{\pi}\frac{\cos lx\cdot\cos my\cdot\cos nz}{\dfrac{2+\alpha}{3\mu}-\dfrac{\cos x+\cos y+\alpha\cos z}{3}}dxdydz$$

[4] Random Walk。

単純立方格子において，原点 (0,0,0) から出発した Random Walker が，とにかく格子点 (l, m, n) に達する確率は次式で与えられる。

(8) $$P(l,m,n)=(u-1)/u$$

$$u=\frac{2+\alpha}{3}I_{lmn}(1;\alpha)$$

ただし，(xy) 面内でとなりの格子点にうつる確率を $\frac{1}{2}\frac{1}{2+\alpha}$，$z$ 軸方向のとなりの格子点に移る確率を $\frac{1}{2}\frac{1}{2+\alpha}$ としてある。I_{lmn} は (7) 式で与えられるものである。

[5] Net Work。

無限にひろがった，三次元 Net Work の格子点 (0,0,0) に外部より，電流 I を入力する。すると，格子点 (l,m,n) に於ける電位 V_{lmn} は次式をみたす。

$$(9)\qquad 6V_{lmn}-\sum_{\delta}V_{lmn+\delta}=R\cdot I\cdot\delta_{l0}\delta_{m0}\delta_{n0}$$

ただし，δについての和は次のものについて行なう。

$$(10)\qquad \delta=(\pm1,0,0),\ (0,\pm1,0),\ (0,0,\pm1)$$

R は格子点間を結ぶ回路の直流抵抗である。方程式 (9) の解は次式により与えられる。[11]

$$(11)\qquad V_{lmn}=\frac{RI}{6}\cdot I_{lmn}(1)$$

〔6〕 格子構造を持つ系のエネルギー密度。

状態密度は格子グリーン関数の虚数部を用いてあらわされる。例えばエネルギー量子 E_k が次式で与えられる場合を考えよう。

(12) $$E_k = A(1-\gamma_k),$$

$$\gamma_k = \frac{1}{z}\sum_{\delta} e^{ik\cdot\delta}$$

z は最近接格子点の数である。このとき，状態密度 $\rho(E)$ は

(13) $$\rho(E) = -\frac{N}{\pi A}\,\mathrm{Im}\,I_{000}\left(\frac{1}{t+i\delta}\right), \quad (\delta \to +0)$$

$$t = 1-\frac{E}{A}$$

で与えられる。

参考文献

1) G. N. Watson, Quart. J. Math. (Oxford) 10 (1939), 266.

2) A. A. Maradudin et al.,Memoires Acad. Royale de Belgique (Science) 14 (1960).

3) G. Iwata, Natural Sci. Rep. Ochanomizu Univ. 20 (1969), 13.

4) T. Morita et al., Math. Division, Dept. Appl. Sci., Tohoku Univ. (1971).

5) M. Tikson, J. Res. Natl. Bur. Stds. 50 (1953), 177.

6) I. Mannari et al., Res. Notes Dept. Phys. Okayama Univ. (1964).

7) T. Kawabe et al., Rep. Res. Lab. Surface Sci. Okayama Univ. 3 (1970), 211.

8) R. Jelitto, J. Phys. Chem. Solids 30 (1969), 609.

9) T. Nakamura, Phys. Rev. 128 (1962), 2500.

10) M. Tanaka et al., Rep. Res. Lab. Surface Sci. Okayama Univ. 3 (1968), 93; 3 (1969), 137, 145; 3 (1970), 189.

11) H. Davies, Quart. J. Math. (Oxford) 6 (1955), 232.