

Lattice Green's Function とその微分

岡大 理 萬成 勲, 川部 健

§ 1. Extended Watson Integral $I_{lmn}(\mu; \alpha)$
単純立方格子において、 z 方向の異方性をもつ Lattice
Green Function を次の式により定義する。

$$I_{lmn}(\mu; \alpha) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\cos lx \cos my \cos nz}{\frac{1}{\mu} \frac{2+\alpha}{3} - \frac{\cos x + \cos y + \alpha \cos z}{3}} dx dy dz \quad (1.1)$$

(1.1) において、 l, m, n は整数で格子点の位置 $R = (l, m, n)a$
に関係づけられる。但し、 a は格子定数。 α は z 方向の結合の異
方性を示す変数である。ここでは

$$\alpha > 0 \quad (1.2)$$

の場合を考える。又 μ については

$$0 \leq \mu \leq 1 \quad (1.3)$$

の範囲に限り、この時の定義 (1.1) を特に Extended Watson
Integral と呼ぶことにする。

$I_{000}(\mu; d)$ 及び $d=1$ のとき (lmn) の簡単な場合の研究は既に詳しく調べられているが^{1), 2)}ここでは (lmn) の一般の場合を取扱う。 $I_{lmn}(\mu; d)$ について、結晶の対称性から

$$I_{lmn}(\mu; d) = I_{men}(\mu; d), \quad (1.4)$$

$$I_{lmn}(\mu; d) = I_{l\pm m \pm n}(\mu; d),$$

及び sum rule

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta} I_{(lmn)+\Delta}(\mu; d) &= -6 \delta_{l0} \delta_{m0} \delta_{n0} + \frac{1}{\mu} (4+2d) I_{lmn}(\mu; d) \\ &+ (1-d) \{ I_{lmn+1}(\mu; d) + I_{lmn-1}(\mu; d) \}, \quad (1.5) \end{aligned}$$

が成り立つことは容易に示される。(1.5)で Δ sum は最近接格子点についての和である。

§ 2. $I_{lmn}(\mu; d)$ とその微分の計算

$I_{00n}(\mu; d)$ 及び $I_{l00}(\mu; d)$ はそれぞれ次の様な 1 重積分に変形される。

$$I_{00n}(\mu; d) = \frac{12}{\pi} \int_0^{1/4} k K(k) \cos 4n\pi \xi \, d\xi, \quad (2.1)$$

$$k = 2\mu / (2+d - d\mu \cos 4\pi \xi), \quad (2.1a)$$

$$I_{l00}(\mu; d) = \frac{12}{\pi\sqrt{d}} \int_0^{1/4} k K(k) \cos 4l\pi \xi \, d\xi \quad (2.2)$$

$$k = 2\mu\sqrt{d} / \sqrt{(2+d - \mu \cos 4\pi \xi)^2 - (d-1)^2 \mu^2} \quad (2.2a)$$

(2.1), (2.2)において, $K(k)$ は第1種完全楕円積分である。

$I_{lmn}(\mu; \alpha)$ は(1.4), (1.5)より $I_{00n}(\mu; \alpha)$ 及び $I_{l00}(\mu; \alpha)$ を用いて表わすことが出来る。次に $I_{lmn}(\mu; \alpha)$ を級数展開の形で求めてみる。 $I_{lmn}(\mu; \alpha)$ を変形ベッセル関数 $I_\nu(t)$ を用いて表わすと。

$$I_{lmn}(\mu; \alpha) = 3 \int_0^\infty I_l(t) I_m(t) I_n(t) \exp\{-(2+\alpha)t/\mu\} dt. \quad (2.3)$$

$$I_\nu(t) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(t/2)^{\nu+2s}}{s! \Gamma(\nu+s+1)}, \quad (2.4)$$

に留意すれば(2.3)はさらに次の様な級数展開に変形される。

$$I_{lmn}(\mu; \alpha) = \sum_{p, q, r=0}^{\infty} \frac{L!}{p! (p+l)! q! (q+m)! r! (r+n)!} \times \frac{\{3\mu/(2+\alpha)\}^{L+1} \alpha^{2r+n}}{6^L}, \quad (2.5)$$

ここで

$$L = 2(p+q+r) + l + m + n, \quad (2.6)$$

次に $I_{lmn}(\mu; \alpha)$ の μ に関する微分について考える。(2.1)より

$I_{00n}(\mu; \alpha)$ の微分は次の形で与えられる。

$$\frac{dI_{00n}(\mu; \alpha)}{d\mu} = \frac{6(2+\alpha)}{\pi\mu^2} \int_0^{1/2} \frac{k^2 E(k) \cos 4n\pi\xi}{1-k^2} d\xi, \quad (2.7)$$

$$k = 2\mu / (2+\alpha - \alpha\mu \cos 4\pi\xi). \quad (2.7a)$$

ここで $E(k)$ は第2種完全楕円積分である。同様にして

$I_{l00}(\mu; d)$ の微分形は (2.2) より.

$$\frac{dI_{l00}(\mu; d)}{d\mu} = \frac{3(2+d)}{\pi d\sqrt{d}\mu^2} \int_0^{1/4} \frac{k^2 \sqrt{4d+k^2(d-1)^2} E(k) \cos 4l\pi\xi}{1-k^2} d\xi, \quad (2.8)$$

$$k = 2\mu\sqrt{d} / \sqrt{(2+d-\mu \cos 4l\pi\xi)^2 - (d-1)^2\mu^2} \quad (2.8a)$$

で与えられる。 $dI_{lmn}(\mu; d)/d\mu$ については $I_{lmn}(\mu; d)$ を求めた場合と同様に、(1.4), (1.5) の関係から (2.7), (2.8) を用いて求められる。

§3. $I_{lmn}(\mu; d)$ の漸近形

(i) $\mu \sim 1$

先ず $I_{00n}(\mu; d)$ について考える。

$$F(\varepsilon) \equiv I_{00n}(\mu; d), \quad (3.1)$$

$$\varepsilon^2 = 1 - \mu, \quad (3.1a)$$

とおく。 $F(\varepsilon)$ を $\varepsilon \ll 1$ とし展開すれば

$$F(\varepsilon) = F(0) + \frac{dF}{d\varepsilon} \varepsilon + \frac{1}{2} \frac{d^2F}{d\varepsilon^2} \varepsilon^2 + \dots, \quad (3.2)$$

$$\frac{dF}{d\varepsilon} = -2\varepsilon \frac{dI_{00n}}{d\mu}, \quad \frac{d^2F}{d\varepsilon^2} = -2 \frac{dI_{00n}}{d\mu} + 4\varepsilon^2 \frac{d^2I_{00n}}{d\mu^2}, \dots \quad (3.3)$$

(2.7), (2.7a) から $dI_{00n}(\mu; d)/d\mu$ の被積分関数は $\xi \sim 0$

で最も大きな寄与をするから、その次1項は、

$$\begin{aligned} \frac{dI_{00n}}{d\mu} &\sim \frac{6(2+d)}{\pi} \int_0^{1/4} \frac{E(1)}{(2+d)(1-\mu) + 8\pi^2 d \xi^2} d\xi \\ &= \frac{3\sqrt{2+d}}{2\sqrt{2d}\pi} \frac{1}{\sqrt{1-\mu}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

$dI_{l00}(\mu; d)/d\mu$ についても、(3.4)と同じ結果が得られる。
(3.1), (3.2) から

$$I_{00n}(\mu; d) = I_{00n}(1; d) - \frac{3\sqrt{2+d}}{\sqrt{2d}\pi} \sqrt{1-\mu} + O(1-\mu). \quad (3.5)$$

$I_{l00}(\mu; d)$ についても同様な展開が得られる。従って、 $I_{lmn}(\mu; d)$ の $\mu \sim 1$ における展開は次の様に表わることが出来る。

$$I_{lmn}(\mu; d) = I_{lmn}(1; d) - \frac{3\sqrt{2+d}}{\sqrt{2d}\pi} \sqrt{1-\mu} + O(1-\mu). \quad (3.6)$$

展開の次3項は $(1-\mu)^1$ で、その係数は一般に l, m, n に依存する。簡単な場合について、 $(1-\mu)^1$ の係数を数値実験で求めた結果を示しておく。

	$(1-\mu)^1$ の係数
$I_{000}(\mu; 1)$	-0.4379
$I_{100}(\mu; 1)$	1.0785
$I_{110}(\mu; 1)$	1.8367
$I_{200}(\mu; 1)$	2.6604

他の結晶型について. BCC, FCC の $I_{000}(\mu; 1)$ はオ1種楕円積分の形で表わされる^{3), 4)} から $(1-\mu)^4$ の係数も比較的容易に求められる。結果は -0.5511 (BCC), -0.5452 (FCC) でこれは数値実験で得られる結果と一致している。

(ii) $\mu \sim 0$

この場合には級数展開による方法, (2.5) が有効となる。そのオ1項だけを示すと。

$$I_{lmn}(\mu; \alpha) = \frac{3 \cdot N!}{2^N l! m! n!} \frac{\alpha^n}{(2+\alpha)^{N+1}} \mu^{N+1} + O(\mu^{N+3}), \quad (3.7)$$

$$N = l + m + n. \quad (3.8)$$

(iii) $\alpha \rightarrow \infty$ ($\mu \neq 1$)

$$\alpha I_{000}(\mu; \alpha) = 3 I_1(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{3 \beta_n(\mu)}{\alpha^n n!} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^n \frac{1}{\sqrt{t^2 - 1}}, \quad (3.9a)$$

$$= \frac{3\mu}{\sqrt{1-\mu^2}} \left\{ 1 - \frac{2}{\alpha} \frac{1}{1-\mu^2} + \dots \right\}, \quad (3.9b)$$

(3.9a) において。

$$t = \frac{1}{\mu},$$

$$I_1(\mu) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{dz}{\frac{1}{\mu} - \cos z}, \quad (3.10)$$

$$\beta_n(\mu) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \left\{ \frac{2}{\mu} - (\cos x + \cos y) \right\}^n dx dy.$$

(iv) $\alpha \rightarrow \infty$ ($\mu = 1$)

(2.2) から

$$I_{000}(1; \alpha) = \frac{12}{\pi\sqrt{\alpha}} \int_0^{1/4} k K(k) d\xi, \quad (3.11)$$

$$k = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{(\alpha + \sin^2 2\pi\xi)(1 + \sin^2 2\pi\xi)}}. \quad (3.11a)$$

k 及び " $K(k)$ " を $1/\alpha \ll 1$ とし $k_0 = 1/\sqrt{1 + \sin^2 2\pi\xi}$ のまわりで展開すれば.

$$k K(k) = k_0 K(k_0) - \frac{E(k_0)}{2k_0} \frac{1}{\alpha} + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right). \quad (3.12)$$

従って $\alpha \rightarrow \infty$ のとき

$$I_{000}(1; \alpha) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left(A + B \frac{1}{\alpha} + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) \right). \quad (3.13)$$

よって

$$A = \frac{12}{\pi} \int_0^{1/4} k_0 K(k_0) d\xi = 1.9286467 \quad (3.14)$$

$$B = -\frac{6}{\pi} \int_0^{1/4} \frac{E(k_0)}{k_0} d\xi = -0.71856855$$

(v) $\alpha \rightarrow 0$ ($\mu \neq 1$)

$$I_{000}(\mu; \alpha) = \frac{3}{2} I_2(\mu) + \frac{3}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n \gamma_n(\mu)}{2^n n! \pi} \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^n 2\mu K(\mu) \quad (3.15a)$$

$$= \frac{3}{\pi} \mu K(\mu) \left\{ 1 - \frac{\alpha}{2} \frac{1}{1-\mu^2} \frac{E(\mu)}{K(\mu)} + \dots \right\}. \quad (3.15b)$$

(3.15a) で

$$t = \frac{1}{\mu},$$

$$I_2(\mu) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{1}{\frac{1}{\mu} - \frac{\cos x + \cos y}{2}} dx dy, \quad (3.16)$$

$$J_n(\mu) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \left(\frac{1}{\mu} - \cos z \right)^n dz.$$

(vi) $\alpha \rightarrow 0$ ($\mu = 1$)

(2.1) から

$$I_{000}(1; \alpha) = \frac{12}{\pi} \int_0^{1/4} k K(k) d\xi, \quad (3.17)$$

$$k = \frac{1}{1 + \alpha \sin^2 2\pi \xi}. \quad (3.17a)$$

 $k \sim 1$ における $K(k)$ の展開公式⁵⁾を用いると.

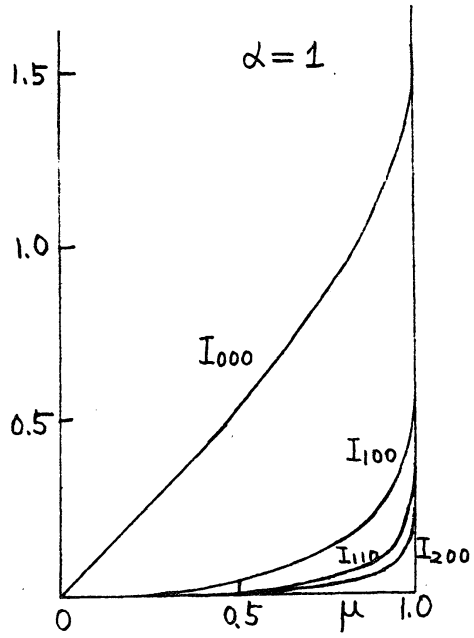
$$K(k) = -\frac{1}{2} \log \alpha + \frac{3}{2} \log 2 - \log(\sin 2\pi \xi) + O(\alpha \log \alpha). \quad (3.18)$$

従って $\alpha \rightarrow 0$ のとき

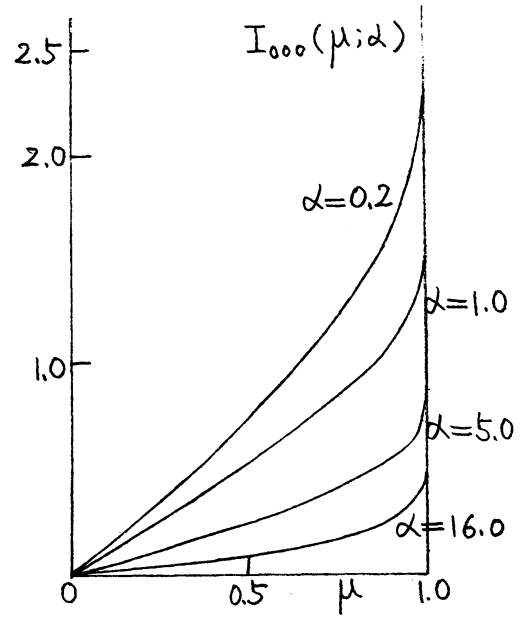
$$I_{000}(1; \alpha) = -\frac{3}{2\pi} \log \alpha + \frac{15}{2\pi} \log 2 + O(\alpha \log \alpha). \quad (3.19)$$

最後に、 $I_{lmn}(\mu; \alpha)$ 及びその微分について、 (lmn) の簡単な場合に数値実験で得た結果をオ1図～オ4図に示しておく。

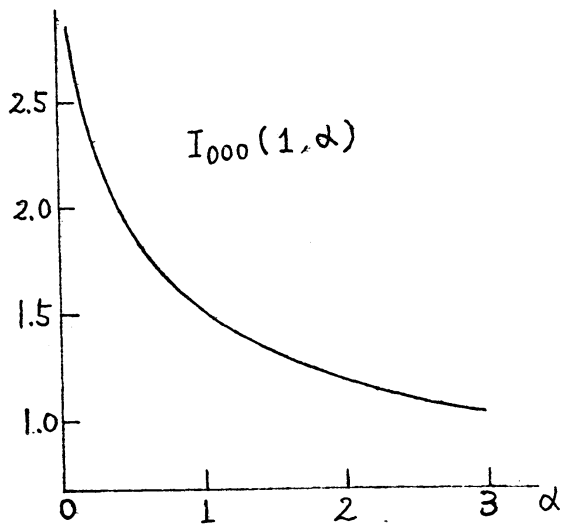
* 1 图



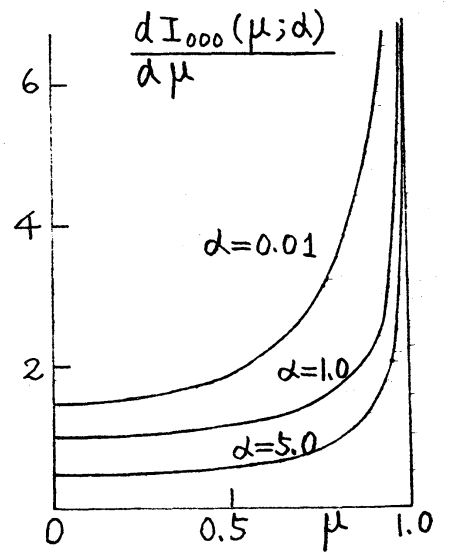
* 2 图



* 3 图



* 4 图



参考文献

- 1) I. Mannari and T. Kawabe, Prog. Theor. Phys. 44(1970) 359.
- 2) T. Kawabe and I. Mannari, Rep. Res. Lab. for SURFACE SCIENCE, Okayama Univ. 3 (1970) 211.
- 3) I. Mannari and C. Kawabata, Res. Notes Dept. Phys., Okayama Univ. No. 15 (1964). P. 4.
- 4) G. Iwata, Natural Sci. Report, Ochanomizu Univ. 20 (1969) 13.
- 5) E. Jahnke and F. Emde, Tables of Functions with Formulae and Curves, 2nd edition (1939) P. 145.