

格子グリーン関数に対する Mellin-Barnes 積分
の応用 - 単純立方格子 -

東北大工 猪苗代 盛

§ 1. 序

格子グリーン関数を具体的に計算する場合に格子スペクトルの中のエネルギーに対する表式を、格子スペクトル外のエネルギーに対する表式から解析接続によって求めることは、一つの有力な方法と考えられる。我々は Mellin-Barnes 積分¹⁾を利用して解析接続によりグリーン関数の種々の巾級数表示を求める。

(1) Mellin-Barnes 積分

Mellin-Barnes 積分

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \phi(s) z^{-s} ds, \quad |\arg z| < \pi \quad (1.1)$$

$$\phi(s) = \frac{\Gamma(\alpha_1+s) \cdots \Gamma(\alpha_m+s) \Gamma(\beta_1-s) \cdots \Gamma(\beta_n-s)}{\Gamma(\gamma_1+s) \cdots \Gamma(\gamma_p+s) \Gamma(\delta_1-s) \cdots \Gamma(\delta_q-s)} \quad (1.2)$$

と考える。

積分の収束性をしらするために

$$s = \sigma + it \quad (1.3)$$

$$z = Re^{i\theta}$$

と書き $|t| \rightarrow \infty$ の被積分関数の行動をしらべる。

$$|z^{-s}| = R^{-\sigma} e^{\theta t} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} |\Gamma(s)| &= |\Gamma(\sigma + it)| \\ &\approx e^{-\frac{1}{2}\pi|t|} |t|^{\sigma - \frac{1}{2}}, \quad |t| \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (4)$$

従って $|t| \rightarrow \infty$ のとき integrand の絶対値は

$$e^{-\frac{1}{2}K\pi|t|} |t|^{K\sigma + k} R^{-\sigma} e^{\theta t} \quad (5)$$

となる。ここで

$$K = m + n - p - \xi$$

$$K = m - n - p + \xi \quad (6)$$

$$\begin{aligned} k &= (\alpha_1 - \frac{1}{2}) + (\alpha_2 - \frac{1}{2}) + \dots + (\beta_1 - \frac{1}{2}) + (\beta_2 - \frac{1}{2}) + \dots \\ &\quad - (\gamma_1 - \frac{1}{2}) - (\gamma_2 - \frac{1}{2}) - \dots - (\delta_1 - \frac{1}{2}) - (\delta_2 - \frac{1}{2}) - \dots \end{aligned}$$

ここで K, K, k の値によりいくつかの場合に分けて考へる。

i) 第I型: $K > 0$ 即ち $m + n > p + \xi$

(分子の Γ 関数の数が分母の Γ 関数の数より多い)

積分(1)は $|\arg z| < \min(\pi, \frac{1}{2}K\pi)$ で収束し、その解析関数である。

ii) 第II型: $K = 0$ i.e. $m + n = p + \xi$ (分母と分子の Γ 関数の数が等しい.)

$$\text{and } K = m - n - p + \xi \neq 0$$

このとき integrand は large $|t|$ に対し

$$|t|^{k\sigma+k} R^{-\sigma} e^{\phi t}$$

となる。積分が収束するためには $\phi=0$ 即ち σ は正の数でなければならぬ。結局 integrand は

$$|t|^{k\sigma+k} R^{-\sigma} \quad (7)$$

となる。

$k\sigma+k < -1$ なら積分は絶対収束し ($k\sigma+k < 0$ なら収束)

$k < 0$ なら

$$f(R) = \left[\frac{1}{2\pi i} \int \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (8)$$

$k > 0$ なら

$$f(R) = \left[\frac{1}{2\pi i} \int \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (8')$$

とあらわせることが示される。ここで (8), (8)' の [] 内の積分は complex z に対し $\arg z < \pi$ で z の analytic function である。

iii) 第III型: $\left. \begin{array}{l} k=0 \\ k=0 \end{array} \right\} \text{i.e. } m=p, n=q$

$k < -1$

ii) と同様に σ が正のときだけ収束する。従って integrand は

$$|t|^k R^{-\sigma} \quad (9)$$

となる。 $k < -1$ で積分は絶対収束し

$R > 1$ ならば

$$f(R) = \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\underline{\leftarrow}} \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (10)$$

$R < 1$ ならば

$$f(R) = \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\overleftarrow{\leftarrow}} \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (10)'$$

とあらわせることが示される。ここで (10), (10)' の [] 内の積分は $|\arg z| < \pi$ かつ $|z| \geq 1$ なる z の analytic function である。

一般にこの二つの analytic function は同じ関数とは限らない。しかし、(1) は絶対収束なので $z=1$ で連続である。

iv) 第IV型: $\left. \begin{array}{l} k=0 \\ K=0 \end{array} \right\} \text{i. e. } m=p, n=q$
 $-1 \leq k < 0$

$z \neq 1$ ときは第III型と同様な性質をもつ。

$z=1$ では連続とは限らなくなる。

§ 2. 単純立方格子のクリーン関数²⁾

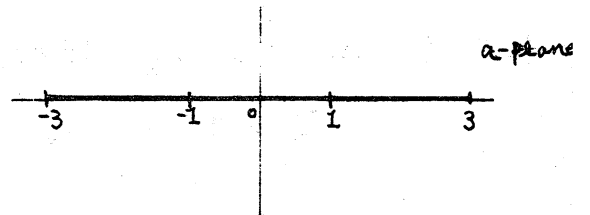
単純立方格子の原点におけるクリーン関数は

$$I(\alpha) = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^\pi \frac{dx dy dz}{\alpha - \cos x - \cos y - \cos z} \quad (2-1)$$

であらわされる。²⁾ この関数は複素 α 平面 α 軸上の線分

$-3 = \alpha \leq 3$ 以外の領域で正則な関数である。

$-3 < \alpha < 3$ では $\alpha = \pm 1, \pm 3$ が特異点になっている。(Van Hove singularities)



$I(a)$ を Mellin-Barnes 積分であらわすと $a > 3$ ではよく知られた級数表示がえられる。Mellin-Barnes 積分の変形により $0 < a < 1$ 及び $1 < a < 3$ の expression がえられる。 $a < 0$ の表式は (2.1) の形を考慮すると $a > 0$ の表式から直ちにえられる。

∴ $a > 0$ ならば

$$\begin{aligned} I(a) &= -\frac{i}{\pi^3} \int_0^\infty dt \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \int_0^\pi dz \\ &\quad \times \exp[i(a - \cos x - \cos y - \cos z)t] \\ &= -i \int_0^\infty e^{iat} [J_0(t)]^3 dt \end{aligned} \quad (2.2)$$

$[J_0(t)]^2$ を Mellin-Barnes 積分であらわすと

$$[J_0(t)]^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2\pi i} \int_{-s-i\infty}^{-s+i\infty} \frac{\Gamma(-s)\Gamma(s+\frac{1}{2})t^{2s}}{[\Gamma(s+1)]^2} ds$$

従って

$$I(a) = \frac{-i}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2\pi i} \int_{-s-i\infty}^{-s+i\infty} ds \frac{\Gamma(-s)\Gamma(s+\frac{1}{2})}{[\Gamma(s+1)]^2} \int_0^\infty e^{iat} J_0(t) t^{2s} dt$$

これに関する積分は $\operatorname{Im} a > 0$ に収束し hypergeometric functions を使つてあらわされる。

$$\int_0^{\infty} x^s \dots = \frac{\Gamma(2s+1)}{(-ia)^{2s+1}} {}_2F_1(s+\frac{1}{2}, s+1; 1; \frac{1}{a^2})$$

従つて

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{2\pi i} \int ds \frac{\Gamma(-s) [\Gamma(s+\frac{1}{2})]^2}{\Gamma(s+1)} \left(-\frac{4}{a^2}\right)^s \times {}_2F_1(s+\frac{1}{2}, s+1; 1; \frac{1}{a^2}) \quad (2.3)$$

§2-1 $a > 3$

$|a| > 1$ ならば ${}_2F_1$ を $\frac{1}{a^2}$ の級数に展開できる。

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! n!} \left(\frac{1}{a^2}\right)^n \times \frac{1}{2\pi i} \int ds \left(-\frac{4}{a^2}\right)^s \frac{\Gamma(-s) \Gamma(s+\frac{1}{2}) \Gamma(s+\frac{1}{2}+n) \Gamma(s+1+n)}{[\Gamma(s+1)]^2}$$

S -積分は Mellin-Barnes 積分の第 I 型であり $|a| > 2$ ならば積分路は右半平面に閉じさせることが出来る。このとき

$S = 0, 1, 2, \dots, m, \dots$ が I 位の極留数計算により

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+\frac{1}{2}) \Gamma(m+n+\frac{1}{2}) \Gamma(m+n+1) 4^m}{(n!)^2 (m!)^3} \left(\frac{1}{a^2}\right)^{m+n} \quad (2.4)$$

がえられる。この 2 重級数は $|a| > 3$ に収束あることが示される。和の順序変更により $\frac{1}{a^2}$ の中級数がえられる。

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{p=0}^{\infty} \Gamma(p + \frac{1}{2}) \Gamma(p+1) (\frac{1}{a^2})^p \\ \times \sum_{m=0}^p \frac{\Gamma(m + \frac{1}{2}) 4^m}{(m!)^2 [(p-m)!]^2} \quad (2.5)$$

あさらに

$|a| > 3$ に対し $I(a)$ は実数で虚数部は 0 である。

§2-2 $0 < a < 1$

${}_2F_1(\cdot; \cdot; 1/a^2)$ の $0 < a < 1$ における関数形は Kummer の relation により ${}_2F_1(\cdot; \cdot; a^2)$ であらわされる。

従って (2.3) は

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{2\pi i} \int ds \frac{\Gamma(-s) [\Gamma(s + \frac{1}{2})]^2}{\Gamma(s+1)} (-\frac{4}{a^2})^s \\ \times \left[\frac{\Gamma(-\frac{1}{2})}{\Gamma(s + \frac{1}{2}) \Gamma(-s)} (-\frac{1}{a^2})^{-s-1} {}_2F_1(s+1, s+1; \frac{3}{2}; a^2) \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(s + \frac{1}{2}) \Gamma(-s + \frac{1}{2})} (-\frac{1}{a^2})^{-s-\frac{1}{2}} {}_2F_1(s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}; a^2) \right] \\ = I_R(a) + i I_I(a) \quad (2.6)$$

ここで s -積分をあらかじめ左半面にまわしておく。

右辺の ${}_2F_1$ を展開すると、

$$I_{\mathbb{R}}(a) = a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{2n}}{n! \Gamma(n+\frac{3}{2})} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} ds \frac{\Gamma(s+\frac{1}{2}) [\Gamma(s+1+n)]^2 4^s}{[\Gamma(s+1)]^3}$$

$s + \frac{1}{2} = 0, -1, -2, \dots$ に 1 位の極があり, その留数を計算するに より

$$I_{\mathbb{R}}(a) = -\frac{a}{2\pi} \sum_n^{\infty} \sum_m^{\infty} \frac{[\Gamma(\frac{1}{2}+m)]^3 (\frac{1}{4})^m a^{2n}}{n! m! \Gamma(\frac{3}{2}+n) [\Gamma(\frac{1}{2}-n+m)]^2} \quad (2.7)$$

これは $|a| < 1$ で収束する。

同様にして

$$I_{\mathbb{I}}(a) = -\frac{i}{2\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\Gamma(m+n+\frac{1}{2})]^3 (\frac{a^2}{4})^n (\frac{1}{4})^m}{n! \Gamma(\frac{1}{2}+n) (m!)^2 \Gamma(m+n+1)} \quad (2.7)'$$

$$\times \left\{ -3\psi(\frac{1}{2}+m+n) + 2\psi(1+m) + \psi(1+m+n) + \log 4 \right\}$$

(ψ は 2 位の極の留数から出てくる。)

§2-3 $1 < a < 3$

この変数の範囲に対しては $a^2 = 5$ を中心とする展開が求められる。これは $|a^2 - 5| < 4$ i.e. $1 < a < 3$ で収束する。

a^2 の大きな値に対し (2.4) を

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\Gamma(\frac{1}{2}+m)]^2}{(m!)^2} (\frac{4}{a^2})^m {}_2F_1(m+1, m+\frac{1}{2}, 1; \frac{1}{a^2}) \quad (2.8)$$

Kummer's relation

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{-a} {}_2F_1(a, c-b, c; \frac{z}{z-1}) \quad (2.9)$$

を使うと

$$I(a) = \frac{1}{\pi} (\frac{1}{a^2-1})^{\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{\Gamma(\frac{1}{2}+m)}{m!} \right]^2 (\frac{4}{a^2-1})^m {}_2F_1(m+\frac{1}{2}, -m, 1; \frac{1}{1-a^2})$$

${}_2F_1$ を展開し和の順序を変えろと

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a^2-1}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+n)\Gamma(\frac{1}{2}+2n)}{(n!)^3} \left(\frac{2}{a^2-1}\right)^{2n} \\ \times {}_2F_1\left(\frac{1}{2}+n, \frac{1}{2}+2n; 1+n; \frac{4}{a^2-1}\right)$$

再び Kummer's relation (2.9) を使うと

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+n)\Gamma(\frac{1}{2}+2n)}{(n!)^3} 4^n \left(\frac{1}{a^2-5}\right)^{2n+\frac{1}{2}} \\ \times {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2n; 1+n; \frac{4}{5-a^2}\right) \\ = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a^2-5}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{\Gamma(-t)\Gamma(\frac{1}{2}+t)\Gamma(\frac{1}{2}+2t)}{[\Gamma(1+t)]^2} \left\{-4\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^2\right\}^t dt \\ \times {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2t; 1+t; \frac{4}{5-a^2}\right)$$

hypergeometric function の $|\frac{4}{5-a^2}| > 1$ に対する表現を入れれば

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a^2-5}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{\Gamma(-t)\Gamma(\frac{1}{2}+t)\Gamma(\frac{1}{2}+2t)}{[\Gamma(1+t)]^2} \left\{-4\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^2\right\}^t dt \\ \times \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \Gamma(\frac{1}{2}+n)\Gamma(2t-n)}{n! \Gamma(\frac{1}{2}-n+t)} \left(\frac{a^2-5}{4}\right)^{n+\frac{1}{2}} \right. \\ \left. + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \Gamma(\frac{1}{2}+2t+n)\Gamma(-n-2t)}{n! \Gamma(\frac{1}{2}-n-t)} \left(\frac{a^2-5}{4}\right)^{n+2t+\frac{1}{2}} \right]$$

この中の積分は Mellin-Barnes 積分の第 I 型であり、左半面に積分路を閉じると留数計算により

$$I(a) = I_R(a) + I_L(a) \quad (2.10)$$

$$I_R(a) = \frac{1}{4\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{a^2-5}{4}\right)^n \\ \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \Gamma(\frac{1}{2}+m)\Gamma(\frac{1}{2}+n+m)\Gamma(\frac{1}{2}+n+2m)}{(m!)^2 (n+2m)!} \left(\frac{1}{4}\right)^m$$

$$\times \left\{ \psi\left(\frac{1}{2}+m\right) - \psi\left(\frac{1}{2}+n+m\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}+n+2m\right) + 2\psi(1+m) + 2\psi(1+n+2m) + \log 4 \right\} \quad (2.11)$$

$$I(a) = \frac{-i}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(p+1)!} \left(\frac{5-a^2}{4}\right)^{p+1} \\ \times \sum_{n=0}^{\leq \frac{p}{2}} \frac{4^n [\Gamma(\frac{1}{2}+n)]^2 \Gamma(p-2n+\frac{1}{2}) \Gamma(p-n+1)}{n! \Gamma(p-2n+1)}$$

$$- \frac{i}{4\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+m) \Gamma(\frac{1}{2}+n+m) \Gamma(\frac{1}{2}+n+2m)}{(m!)^2 n! (n+2m)!}$$

$$\times \left(\frac{1}{4}\right)^m \left(\frac{5-a^2}{4}\right)^n \quad (2.11)'$$

§ 3. 任意の格子点におけるグリーン関数

$$I_{emn}(a) = \frac{1}{\pi^3} \iiint_{\cdot}^{\pi} \frac{\cos lx \cdot \cos my \cdot \cos nz}{a - \cos x - \cos y - \cos z} dx dy dz$$

にも同様な計算を行うことが出来る。その他2次元の *rectangular lattice* 及びその特別な場合として *square lattice* の場合も Mellin-Barnes 積分を利用して級数表示が求められている。

§ 4. 問題点

この Mellin-Barnes 積分の方法では、simple cubic lattice のグリーン関数の $a=1$ 及び $a=3$ における展開がまだ見出されてはいない。格子点 l, m, n が原点から与られている場合のグリーン関数の漸近形と共に、今後に残された問題である。

reference

- 1). Bateman's Manuscript Project, Higher Transcendental Functions, ed. A. Erdélyi, McGraw-Hill, New York (1953);
A. L. Dixon and W. L. Ferrar, Quant. J. Math., Oxford.
- 2). S. Katsura, S. Inawashiro, and Y. Abe, J. Math. Phys. (1971).
- 3). S. Katsura and S. Inawashiro, J. Math. Phys. (1971).