# 11. Note on Green's Function Method in Many − Impurity Problems in Solids

京大基研　　武 野 正 三

一体近似に基づいて，結晶格子内の多数の不純物が電子，格子振動，スピン波，Frenkel exciton 等に及ぼす影響を調べる際，グリーン関数法を用いると，一体グリーン関数 G の満す式

$$G = \mathcal{g} + \mathcal{g}VG \tag{1}$$

を解く事が必要になる，此処に $\mathcal{g}$ は不純物が存在しない場合の完全結晶格子のグリーン関係，V は不純物の影響を表わす，$\mathcal{g}$ を既知として(1)の解を調べるのがグリーン関係の方法である。

多数の不純物がランダムに格子内に存在する場合，(1)は通常グラフ法を用いて解かれている；Langer の方法[1]は最も標準的なものの一つであろう。又，(1)の座標表示に対しては Matsubara − Toyozawa の方法が用いられて来た[2),3)]，グラフ法は物理的意味がはっきりしていて，(1)の最もオーソドックスな解法であるが，その近似の数学的な面等は余り吟味されていないように思われる。

系の素励起エネルギーは G の pole 即ち行列式

$$D = \det | I - \mathcal{g}V | \tag{2}$$

( I は unit matrix ) に含まれていることを考慮すれば，(1)の近似解より求められる自己エネルギー $\Sigma$ と D の間に或関係が存在する筈であろう。このような事を考慮して，(1)の別の解法を試み，そのため Feenberg の方法[4]を適用した。

(1)　の座標表示を次の形に書く

$$G(nn', E) = \mathcal{g}(nn', E) + \sum_i f(ni, E)G(in', E) \tag{3}$$

但し

$$f(ni) = \sum_j \mathcal{g}(nj)\, V(ji) \tag{4}$$

此処に n, n′ は格子点を表わし，$i$, $j$ は不純物により乱された格子点を表わす，(3)を iteration の方法を用いて解く場合，展開の各項は例えば不純物により乱された格子点を歩く random walk に対応づけられるが，すべての walk に対して異った格子点を歩くよう展開項を整理するのが Feenberg の方法の精神である。

以下最も簡単な場合

$$V(ij) = V\triangle(ij) \tag{5}$$

（△はクロネッカーのデルタ）に話を限る。すると(3)の解は次の形に書ける。

(i)　n : host site

$$G(nn') = g(nn') + V\sum_i g(ni)\frac{1}{D(i)}g(in') + V^2\sum_i\sum_{i_1(\neq i)} g(ni)\frac{1}{D(i)} g(ij_1)\frac{1}{D(i_1)}g(i_1 n') + V^3\sum_i\sum_{i_1(\neq i)}\sum_{i_2(\neq i_1 i)} g(ni)\frac{1}{D(i)} g(ii_1)\frac{1}{D(i_1)}g(i_1 i_2)\frac{1}{D(i_2)}g(i_2 n') + \cdots\cdots \tag{6}$$

(ii)　$n = i$　impurity site

$$G(in') = \frac{1}{D(i)}\left\{ \text{(6)式の } G(nn') \text{ に於て } n = i \text{ とおいた項} \right\} \tag{7}$$

where

$$\begin{cases} D(i) = 1 - Vg(ii) - V^2\sum_{i_1(\neq i)} g(ii_1)\frac{1}{D(i_1)}g(i_1 i) - V^3\sum_{i_1(\neq i)}\sum_{i_2(\neq i_1 i)} g(ii_1)\frac{1}{D(i_1)}g(i_1 i_2)\frac{1}{D(i_2)}g(i_2 i)\cdots\cdots \\ D(i_1) = 1 - Vg(i_2 i_2) - V^2\sum_{i_2(\neq i_1, i)} g(ii_2)\frac{1}{D(i_2)}g(i_2 i) - V^3\sum_{i_2(\neq i_1 i)}\sum_{i_3(\neq i_2 i_1 i)} g(i_1 i_2)\frac{1}{D(i_2)}g(i_2 i_3)\frac{1}{D(i_3)}g(i_2 i_3)\frac{1}{D(i_3)}g(i_3 i)\cdots \end{cases} \tag{8}$$

Dに対する表式は逐次的に得られている。 leading term D($i$) の数学的な意味は，方程式

$$D(i) = 0 \tag{9}$$

の根は方程式

$$D = \det |\triangle(ij) - V g(ij)| = 0 \tag{2'}$$

に於て

$$\lim \quad 1 - V g(ij) = 0 \qquad \text{all } j \neq i \tag{10}$$

$$g(ij) \to 0$$

となる根に等しいと云うことである。

(6)に於てすべてのDを等しいと云う近似をおき，ランダムな不純物の分布を仮定すれば，不純物の濃度が小さい時（もっと正確には Yonezawa Matsubara の方法を適用しなければならない[3]），(6)は次の如くなる。

$$G(nn') \equiv G(nn', E) = g(nn', E - \Sigma) \tag{11}$$

但し

$$\Sigma = \frac{cV}{D} \tag{12}$$

C は不純物の濃度である，(8)より Σ の逐次近似は

$$\Sigma^{(0)} = cV \tag{13 I}$$

$$\Sigma^{(1)} = \frac{cV}{1 - V g(ii)} \qquad (g(ii) \text{ は } i \text{ によりぬ}) \tag{13 II}$$

$$\Sigma^{(2)} = \frac{cV}{1 - V g(ii) - V^2 \sum_{i_1 (\neq i)} \frac{g(i i_1) g(i_1 i)}{1 - V g(i_1 i_1)}} \tag{13 III}$$

……… ………………

(13I)はvirtual crystal近似，(13II)はone−inpurity poblen 迄正確に解いた解，(13III)は two impurity poblem 迄正確に解いた解……となっている。以下 three impurity,four impurity…… 迄正確に解いた自己エネルギーの式が逐次近似的に容易に得られる。さて，この方法の終局はDに元の行列式を取った(12)の形のものであろう，然しながら(6)の計算にconsistentなDの求め方をすれば，自己エネルギーとして

$$\Sigma = \frac{c\,V}{1-V\,g(ii_1\ E-\Sigma)} \tag{14}$$

が当然得られる。これは一つの self− consistentな解となっている。(14)は Davies−Langer[5]の結果に同等である。(14)は(8)から容易に分るように可成粗い解になっている。このような解からは例えばスペクトルに見られる fine structure[6),7)]は出て来ない。これは想像であるが，(8)をもっと正解に解いて，始めてfine structure が得られるであろう，然しながら，物理量を観測する場合，装置の分解能等に限度があるから，解(14)は普通の観測量に付しては良い近似になっているものと思われる。

以上得られた方法とグラフ法との対応は容易であるが，話は一切省略する。尚，この方法を分子結晶内の Frenkel exciton に適用するのが主な目的であったが，数値計算が未完成のため，結果の紹介は省略する。

References

1) J.S.Langer, J.Math. Phys. 2, 584(1961).
2) S.Takeno, Prog. Theor. Phys. 28, 33(1962); 28, 631(1962).
3) F.Yonezawa, Prog. Theor Phys. 31, 357(1964); F.Yonezawa and T.Matsubara, Prog. Theor. Phys. 35, 357, 759(1966).
4) E.Feenberg, Phys. Rev. 74, 206(1948).
5) R.W.Davies and J.S.Langer, Phys. Rev. 131, 163(1963).
6) P.Dean, Proc. Roy. Soc. A254, 507(1960), A260, 263(1961).
7) H.Matsuda, Prog. Theor. Phys. 31, 161(1964).
尚，他に引用すべき文献は多数あるが，省略する。