Friedel Sum Rule の一般化について

京大理（物理）　長谷川　洋

非周期系のスペクトルに対するグリーン関数法が次第に体系化されつつある。[1] "randomness" の本質に迫る手段としてその有効性に対する評価はいまだ定まっていないようであるが，ここで取り上げる課題は，グリーン関数の生命ともいうべき「解析」的立場をもう一段掘り下げてみることである。

さきに筆者は或る種の簡単な仮定のもとに self-consistent に計算された不純物帯の状態密度が期待される規格化条件

$$\int_{\text{不純物帯域}} D(E)\,dE = N_i \tag{1}$$

（不純物帯の状態密度のその領域での積分が不純物数に等しい。）

を満すことを示した[2]が，それは「状態密度関数」とエネルギー変数Eとの関数論的対応 ― 複素構造 ― を調べることによって得られたものである。その後の考察からこの事実が，散乱理論に現れる密度と phase-shift との間の一般的関係[3]（これを簡単のため Friedel Sum Rule と呼んでおく）の自然な延長とみなされることがわかった。それで標記の題のもとにグリーン関数の解析性をもう少し詳しく調べることにしたわけである。

散乱理論では次のような等式が現れる。

$$\mathrm{tr}\left\{G(E)-G_0(E)\right\} = \frac{d}{dE}\,\mathrm{tr}\,\log\left\{1-V\,G_0(E)\right\} \tag{2}$$

ここに $G(E)$ および $G_0(E)$ は，ハミルトニアン $H=H_0+V$ のように自由運動 H_0 と散乱ポテンシアル V との和で書かれるような H に対するグリーン関数および非摂動系のグリーン関数であり，したがって (2) の左辺はその差の trace すなわち散乱体が入ったための状態密度関数の変化分を表わす。また，散乱波の振巾は V に対する T-行列

$$T = V\left\{1-V\,G_0(E)\right\}^{-1} \tag{3}$$

で与えられるから，（2）の右辺の $\frac{d}{dE}$ の次に来る部分は，散乱波の phase shift の総和を表わすものである。ポテンシャルVが球対称である一電子の散乱において，（2）の両辺をE＝－∞からEまで積分して得られる結果

$$\int_{-\infty}^{E}\{\rho(E')-\rho_0(E')\}\,dE' = \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{1}{\pi}(2\ell+1)\,\delta_\ell(E) \qquad (4)$$

がいわゆる Friedel Sum Rule にほかならない。この場合特に E＜0 の区域に（有限個の）束縛状態がある場合が興味深い。そのとき，積分を－∞からE＝0までとすれば，左辺はその束縛状態の総数を与え，従って右辺 $\sum_{\ell=0}\frac{1}{\pi}(2\ell+1)\,\delta_\ell(E)$ がそれに等しくなることを意味する。

以上の結果はもちろん散乱体が広い空間中ただ1個しかないとした場合の議論であり，不純物が多数あることを explicit に扱う理論にとっては非常に不満足なものでしかない。※)

平均操作を入れること等適切な近似にしたがってこれを多数の散乱体がある場合に拡張することは有意義と思われる。実際，多重散乱のグリーン関数理論の第一の課題は「単一不純物散乱の継続」部分を如何に完全に取り入れるかということ[1]と思われるので，その場合（2）式の右辺を reduce して個々の散乱の phase shift の組合せで表わすことが出来ればもっとも望ましいわけである。

文献（2）で示したモデル（自由電子がランダムに分布する不純物中心の短距離ポテンシャルの場を運動する — Yonezawa モデル）は上のような要請

※) Friedel Sum Rule は，元来金属中の荷電中心がそのごく近くで完全にスクリーンされるという直観的要請を満すように述べられたもので，そのどの部分が数学的に導かれることであり，どの部分が物理的仮定なのか極めて confusing であった。そのためにか，何人かの人々によって色々の角度から調べ直されている。その一つの問題点は（4）の左辺を“局所的密度”と定義する点にあると思われる。すなわち実際の金属中の不純物を考えるとき，たった1個だけを問題にすることは元来出来ない筈であるが，それをそうするためには不純物1個のまわりに他の不純物が入らない程度の局所的な空間を限定して，その範囲での「密度」の変化を考えないわけにはゆかなかったと云えよう。このような問題の取り上げは，最近 Anderson と McMillan によって行なわれた。[4]

をまさによく満すものであることがわかった。そして規格化条件 (1) はその必然的な結果に他ならない。また，その後小野寺氏は異るモデル — 二種類の原子からなる混晶の Frenkel 型励起子の分離したバンド — について同様に簡単な規格条件が成立つことを確かめた。[5] 更に米沢と筆者とが格子振動の場合（D. W. Taylor の問題[6]）にあてはめて調べた結果も同様である。この二例では，phase shift の部分に相当するものは自由電子の場合と異り，米沢氏の "self-contained approach"[1] の第一項 $\Sigma(1,1)$ である。

以上のような結果は近い将来詳細を発表する予定でいるが，これに関聯する諸問題として，諸種の分散関係式，グリーン関数自体の持つ解析性とその sum rule，電気伝導度に関する sum rule，軌道反磁性への応用等々があげられる。また s-d 相互作用もこの角度から眺め直すならば面白いのではないかと考えられる。

文献

1) A. Systematic Approach to the Problems of Random Lattices I
F. Yonezawa ; preprint

2) 長谷川　洋； 物性研究短期研究会「不純物伝導」予稿集，昭和43年1月

3) J. Friedel ; Phil. Mag. 43 153 (1952)

4) P. W. Anderson and W. L. McMillan ; Enrico Fermi Summer Institute Lecture

5) 小野寺正嘉； 私信

6) D. W. Taylor ; Phys. Rev. 156 1017 (1967)

7) H. Hasegawa and F. Yonezawa ; to be published