

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

$$G = g + gVG \quad (1)$$

を解く事が必要になる，此処に 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数， V は不純物の影響を表わす， g を既知として(1)の解を調べるのがグリーン関数の方法である。

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

$$D = \det | I - gV | \quad (2)$$

(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 Σ 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

$$G(nn', E) = g(nn', E) + \sum_i f(ni, E) G(in', E) \quad (3)$$

但し

$$f(ni) = \sum_j g(nj) V(ji) \quad (4)$$

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

$$V(ij) = V\Delta(ij) \quad (5)$$

(Δ 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

$$\begin{aligned} G(nn') &= g(nn') + V \sum_i g(ni) \frac{1}{D(i)} g(in') + V^2 \sum_i \sum_{i_1 (\neq i)} g(ni) \frac{1}{D(i)} \\ &\quad g(ij_1) \frac{1}{D(i_1)} g(i_1 n') + V^3 \sum_i \sum_{i_1 (\neq i)} \sum_{i_2 (\neq i_1 i)} g(ni) \frac{1}{D(i)} \\ &\quad g(ii_1) \frac{1}{D(i_1)} g(i_1 i_2) \frac{1}{D(i_2)} g(i_2 n') + \dots \quad (6) \end{aligned}$$

(ii) $n = i$ impurity site

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

where

$$\left\{ \begin{aligned} D(i) &= 1 - V g(ii) - V^2 \sum_{i_1 (\neq i)} g(ii_1) \frac{1}{D(i_1)} g(i_1 i) - V^3 \sum_{i_1 (\neq i)} \sum_{i_2 (\neq i_1 i)} \\ &\quad g(ii_1) \frac{1}{D(i_1)} g(i_1 i_2) \frac{1}{D(i_2)} g(i_2 i) \dots \dots \dots \\ D(i_1) &= 1 - V g(i_2 i_2) - V^2 \sum_{i_2 (\neq i_1, i)} g(i_2 i_2) \frac{1}{D(i_2)} g(i_2 i) - V^3 \sum_{i_2 (\neq i_1 i)} \\ &\quad \sum_{i_3 (\neq i_2 i_1 i)} g(i_1 i_2) \frac{1}{D(i_2)} g(i_2 i_3) \frac{1}{D(i_3)} g(i_2 i_3) \frac{1}{D(i_3)} g(i_3 i) \dots \end{aligned} \right. \quad (8)$$

武野正三

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

$$D(i) = 0 \quad (9)$$

の根は方程式

$$D = \det |\Delta(ij) - V g(ij)| = 0 \quad (2')$$

に於て

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

$$g(ij) \rightarrow 0$$

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。

$$G(nn') \equiv G(nn', E) = g(nn', E - \Sigma) \quad (11)$$

但し

$$\Sigma = \frac{cV}{D} \quad (12)$$

c は不純物の濃度である、(8)より Σ の逐次近似は

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

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

$$\Sigma^{(2)} = \frac{cV}{1 - V g(ii) - V^2 \sum_{i_1 (\neq i)} \frac{g(ii_1) g(i_1 i)}{1 - V g(i_1 i_1)}} \quad (13III)$$

.....

(13I)はvirtual crystal近似, (13II)はone-impurity problem 迄正確に解いた解, (13III)はtwo impurity problem 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

$$\Sigma = \frac{c V}{1 - V g(i i_1, E - \Sigma)} \quad (14)$$

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-Langer⁵⁾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。