

格子グリーン関数

東北大工 桂 重俊

§1. 序

格子 Green 関数は random walk の問題, 格子振動の問題, 強磁性, 反強磁性の Heisenberg 模型の問題, 金属中の impurity の問題等, 多くの固体物理学にあらわれる. 1969 年頃より Katsura, Morita, Inawashiro, Horiguchi, Abe, Yamazaki は格子 Green 関数の研究をはじめた. その一つの流れは解析接続と Mellin-Barnes 積分の応用 (Katsura, Inawashiro, Abe) であり もう一つの流れは楕円積分の積分と定差方程式の利用 (Morita, Horiguchi, Yamazaki) である. band の外の知識を解析接続することにより band の中の知識を得ることが出来, 従来比較的困難であった band 中の格子 Green 関数の値も容易に得られるようになった. これらの諸方法を用いて $\wedge, l, m, n$ の注意の値に対し, また各種結晶格子に対して種々の研究がなされた. その結果の一部は 1969 年 および 1970 年の 数理

解析研、アルゴリズムに関する研究会、1970年、1971年、日本物理学会等に発表し、J. Math. Phys., J. Phys. Soc. Japan¹⁻¹⁴等に投稿したが此度 Mannari さんのお蔭で格子グリーン関数に関する研究会が開かれることになった。

Morita, Horiguchi 両氏は渡米のためにこの研究会に出席されなかつたことは残念であるが、最近送られて来た preprint¹³を Inawashiro 氏により代読される予定である。また最近 Morita, Horiguchi により sc, bcc, fcc に対して band の外, 内に対する原点における格子 Green 関数の数表¹²が出来たことを紹介しておく。

格子 Green 関数の物理的, 解析的, 数値的の review は、
(なお refs. 15, 16 参照)
ref. 1 に与えたので、 $\Lambda = 2$ では格子 Green 関数があらわれる諸問題のいくつかについて解説を行いたい。

§2. 格子空間における Helmholtz 方程式¹

連続空間における Helmholtz の微分方程式は波動関数 $\psi(\underline{r})$ に対して

$$\frac{1}{2}\Delta\psi + E\psi = 0 \quad (2.1)$$

で与えられる. Green 関数 $G(\underline{r}, \underline{r}')$ は

$$\frac{1}{2}\Delta G(\underline{r}, \underline{r}') + E G(\underline{r}, \underline{r}') = -\delta(\underline{r} - \underline{r}') \quad (2.2)$$

の解である. 微分演算に対応する格子空間における演算は差分演算である. 即ち

$$\frac{\Delta f}{\Delta x} = f_{n+\frac{1}{2}} - f_{n-\frac{1}{2}} \quad (2.3)$$

$$\frac{\Delta}{\Delta x} \left(\frac{\Delta}{\Delta x} \right) f = f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1} \quad (2.4)$$

である (Δx は格子間隔にとって). (4) を特定の結晶構造をもつ格子に拡張すると (1) 及び (2) に対応して

$$\frac{1}{2} \sum_{\underline{\Delta}} \phi(\underline{r} + \underline{\Delta}) + \left(E - \frac{Z}{2}\right) \phi(\underline{r}) = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{\underline{\Delta}} G(\underline{r} + \underline{\Delta}) + \left(E - \frac{Z}{2}\right) G(\underline{r}) = \delta_{\underline{r}, 0} \quad (2.6)$$

が得られる。(6)をみたす G を格子 Green 関数という。

ここで $\underline{n} = (l, m, n)$ で Δ は最近接格子ベクトル即ち
sc, bcc, fcc に対して

$$\Delta = (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) \quad \text{sc} \quad (2.7)$$

$$\Delta = (\pm 1, \pm 1, \pm 1) \quad \text{bcc} \quad (2.8)$$

$$\Delta = (0, \pm 1, \pm 1), (\pm 1, 0, \pm 1), (\pm 1, \pm 1, 0) \quad \text{fcc} \quad (2.9)$$

である。(5)に

$$\phi(\underline{n}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{n}} \quad (2.10)$$

$$\underline{k} = (x, y, z) \quad (2.11)$$

$$\underline{n} = (l, m, n) \quad (2.12)$$

といれ(7)(8)(9)を考慮すると(5)の固有値
として

$$E_{\underline{k}} = 3 - \cos x - \cos y - \cos z \quad \text{sc} \quad (2.13)$$

$$E_{\underline{k}} = 4(1 - \cos x \cos y \cos z) \quad \text{bcc} \quad (2.14)$$

$$E_{\underline{k}} = 2(3 - \cos x \cos y - \cos y \cos z - \cos z \cos x) \quad \text{fcc} \quad (2.15)$$

と得る。周期的境界条件 $\phi(\underline{r} + L\hat{e}_i) = \phi(\underline{r})$ より $\underline{k} = 2\pi\underline{\lambda}/L$,
 $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z = 0, 1, 2, \dots, L-1$ が得られる。

次に

$$G(E, \underline{r}) = \frac{1}{N} \sum \underline{A}_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} \quad N = L^3 \quad (2.16)$$

とおきこれを (16) にいれると両辺の $e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$ の係数を等しいとおいて

$$\underline{A}_{\underline{k}} = \frac{1}{E - E_{\underline{k}}} \quad (2.17)$$

が得られる。即ち

$$G(E, \underline{r}) = \frac{1}{N} \sum \frac{1}{E - E_{\underline{k}}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} \quad (2.18)$$

である。いま

$$H_0 G(\underline{r}, s) = -\frac{1}{2} \sum_{\Delta} G(\underline{r} + \Delta, s) + \frac{2}{2} G(\underline{r}, s) \quad (2.19)$$

と書くと (5), (6), (18) は

$$H_0 \phi_{\underline{k}}^{(0)}(\underline{r}) = E_{\underline{k}}^{(0)} \phi_{\underline{k}}^{(0)}(\underline{r}) \quad (2.20)$$

$$(H_0 - E) G^{(0)}(\underline{r}, s) = \delta_{\underline{r}, s} \quad (2.21)$$

$$G^{(0)}(\underline{r}, s) = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} \frac{\phi_{\underline{k}}^{(0)*}(s) \phi_{\underline{k}}^{(0)}(\underline{r})}{E - E_{\underline{k}}^{(0)}} \quad (2.22)$$

$$G^{(0)} = \frac{1}{E - H_0} \quad (2.23)$$

と書くことが出来る。(20)(21)(22)(23) は H_0 の explicit な形によらないから

$$H = H_0 + V \quad (2.24)$$

に対して H の規格化された固有関数を $\phi_k(r)$ とすると

$$H \phi_k(r) = E_k \phi_k(r) \quad (2.25)$$

$$(H - E)G(r, s) = \delta_{rs} \quad (2.26)$$

$$G(r, s) = \frac{1}{N} \sum \frac{\phi_k^*(s) \phi_k(r)}{E - E_k} \quad (2.27)$$

$$G = \frac{1}{E - H} \quad (2.28)$$

$$= \frac{1}{E - H_0 - V} \quad (2.29)$$

$$= \frac{1}{E - H_0} + \frac{1}{E - H_0} V \frac{1}{E - H_0 - V} \quad (2.30)$$

$$= G^{(0)} + G^{(0)} V G \quad (2.31)$$

が成立つ。これを Dyson の方程式という。(31) より

$$G = \frac{1}{1 - G^{(0)} V} G^{(0)} \quad (2.32)$$

が成立つ。

格子グリーン関数 $G(E \pm i\epsilon, 0)$, $\epsilon \rightarrow 0$ は $E > E_{k \max}$

及び $E < E_{k \min}$ (エネルギーバンドの外部) に対して実数
 $E_{k \min} < E < E_{k \max}$ (エネルギーバンドの内部) に対して
 複素数であり $E = E_{k \max}$, $E_{k \min}$ (及びその他の特定の
 E) において特異点をもつ.

$$1/(x-i\epsilon) = P(1/x) + i\pi\delta(x)$$

であるから

$$\frac{1}{\pi} \text{Im} G(E-i\epsilon, 0) = \frac{1}{N} \sum \delta(E-E_k) \quad (2.33)$$

が成立つ。即ち $\frac{1}{\pi} \text{Im} G(E-i\epsilon, 0)$ は状態密度をあらわす。

(18) により $N \rightarrow \infty$ において次の積分があらわれる。

$$I_{\text{ortho}}(a; l, m, n; r_1, r_2, r_3)$$

$$= \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^\pi \frac{\cos lx \cos my \cos nz \, dx dy dz}{a - r_1 \cos x - r_2 \cos y - r_3 \cos z} \quad (2.34)$$

$$I_{\text{sc}}(a; l, m, n) = I_{\text{ortho}}(a; l, m, n; 1, 1, 1) \quad (2.35)$$

$$I_{\text{tetra}}(a; l, m, n; \gamma) = I_{\text{ortho}}(a; l, m, n; 1, 1, \gamma) \quad (2.36)$$

$$I_{\text{rect}}(a; l, m; \alpha, \beta) = I_{\text{ortho}}(a; l, m, 0; \alpha, \beta, 0) \quad (2.37)$$

$$I_{\text{sq}}(a; l, m) = I_{\text{ortho}}(a; l, m, 0; 1, 1, 0) \quad (2.38)$$

$$I_{\text{bcc}}(a; l, m, n) = \frac{1}{\pi^3} \iiint \frac{\cos lx \cos my \cos nz \, dx dy dz}{a - \cos x \cos y \cos z} \quad (2.39)$$

$$I_{\text{fcc}}(a; l, m, n)$$

$$= \frac{1}{\pi^3} \iiint \frac{\cos lx \cos my \cos nz \, dx dy dz}{a - \cos x \cos y - \cos y \cos z - \cos z \cos x} \quad (2.40)$$

(33) の G とは

$$I_{sc}(a; l, m, n) = -G(E, \underline{r}), a=3 = -E + i\epsilon \quad (2.41)$$

$$I_{bcc}(a; l, m, n) = -4G(E, \underline{r}), a=1 = (-E + i\epsilon)/4 \quad (2.42)$$

$$I_{fcc}(a; l, m, n) = -2G(E, \underline{r}), a=3 = (-E + i\epsilon)/2 \quad (2.43)$$

ortho, tetra, sc, bcc, fcc, rect, sg はそれぞれの結晶形を示す。

で結ばれる。 (34) における r_1, r_2, r_3 は orthorhombic lattice における force constant であるが、(34) は simple cubic lattice における 2 体の Green function とみなすことも出来る。これについては § 参照。

$l = m = n = 0$, $a = 3$ (sc, fcc), $a = 1$ (bcc) に対する I_{sc} , I_{bcc} , I_{fcc} の値は Watson により求められこれを Watson 積分¹⁷ という。 $a > 3$ (sc, fcc), $a > 1$ (bcc) に対する値は Mannari-Kawakata¹⁸ により与えられ Extended Watson integral と名づけられている。格子グリーン関数の物理的、解析的、数値的諸研究に対する review は ref. 1 に与えてあるので次節以下において格子グリーン関数 = generalized extended Watson integral があらわれて来る物理的諸問題の概観を与えよう。

§ 3. Random Walk¹⁹

d 次元空間の lattice point $\underline{m}$ の random walk を考える。
walker は nearest neighbor lattice point へのみ移りうる
とある。 lattice point $\underline{m}$

$$\underline{m} = (m_1, m_2, \dots, m_d)$$

とする。 $P(\underline{m}; \nu)$ は ν step の後に walker が点 $\underline{m}$ に存
在する確率とする。 $\frac{1}{2}r_j \in (m_1, \dots, m_j, \dots)$ から $(m_1, \dots, m_j \pm 1, \dots)$
にうつる確率 ($\sum r_j = 1$) とすると

$$\begin{aligned} P(m_1, \dots, m_d; \nu+1) \\ = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d r_j [P(m_1, \dots, m_j+1, \dots, m_d; \nu) \\ + P(m_1, \dots, m_j-1, \dots, m_d; \nu)] \end{aligned} \quad (3.1)$$

が成立つ。 periodic boundary condition (d 次元 torus 上
の random walk)

$$\begin{aligned} P(m_1 + l_1 N, m_2 + l_2 N, \dots, m_d + l_d N; \nu) \quad (3.2) \\ = P(m_1, \dots, m_d; \nu) \end{aligned}$$

(l_j は整数) を課する。いま

$$P(\underline{m}, \nu) = x^\nu N^{-\frac{N}{2}} \exp\left\{2\pi i (\underline{S}, \underline{m})/N\right\} \quad (3.3)$$

$$\underline{S} = (S_1, \dots, S_d), \quad S_j = 1, 2, \dots, N.$$

とおき (3) を (1) に入れ (2) を用いると

$$\chi(s_1, \dots, s_d) = \sum_{j=1}^d r_j \cos(2\pi s_j / N) \quad (3.4)$$

となる。これはバーツの (1) の特別解であるから一般解はその重なりとして

$$P(\underline{m}; \nu) = \sum_{s_1, \dots, s_d=1}^N a(s_1, \dots, s_d) \times [\chi(s_1, \dots, s_d)]^\nu N^{-\frac{d}{2}} \exp[2\pi i (\underline{s} \cdot \underline{m}) / N] \quad (3.5)$$

で与えられる。 $\nu = 0$ を入れると $a(s_1, \dots, s_d)$ は初期条件として与えられている。 $\nu = 0$ のときの存在確率 $P(\underline{m}; 0) \equiv P(\underline{m})$ の Fourier 成分であることがわかる。即ち

$$a(s_1, \dots, s_d) = N^{-\frac{d}{2}} \sum P(\underline{m}_1, \dots, \underline{m}_d) \exp[-2\pi i (\underline{s} \cdot \underline{m}) / N] \quad (3.6)$$

$\nu = 0$ で $\underline{m}'$ にあった walker が ν step の後に $\underline{m}$ に存在する確率 $P(\underline{m}, \underline{m}'; \nu)$ は

$$P(\underline{m}, \underline{m}'; \nu) = N^{-d} \sum_{s_1, \dots, s_d=0}^N \left\{ \sum_{j=1}^d r_j \cos(2\pi s_j / N) \right\}^\nu \times \exp\{2\pi i \underline{s} \cdot (\underline{m} - \underline{m}') / N\} \quad (3.7)$$

で与えられる。無限に大きな系では $N \rightarrow \infty$ として

$$P(\underline{m}, \underline{m}'; \nu) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int \left\{ \sum r_j \cos k_j \right\}^\nu \times \exp[i \underline{k} \cdot (\underline{m} - \underline{m}')] d\underline{k} \quad (3.8)$$

(8) は $\underline{n} = \underline{m} - \underline{m}'$ とし, 次の母関数 $G(\underline{n}, y)$ の $y^{-\nu}$ の係数である.

$$\begin{aligned} G(\underline{n}, y) &= \sum_{\nu=0}^{\infty} P(\underline{n}, \nu) y^{-\nu} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int \frac{\exp(i \underline{n} \cdot \underline{k}) d k_1 \dots d k_d}{y - \sum_{j=1}^d r_j \cos k_j} \quad (3.9) \\ &= y \int_0^{\infty} \prod_{j=1}^d [e^{-\alpha y r_j} I_{n_j}(\alpha r_j)] d\alpha \end{aligned}$$

== に

$$I_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i n k} e^{x \cos k} dk$$

特に ν step の後原点にもどる確率の母関数は

$$\begin{aligned} G(0, y) &= y \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int \frac{d k_1 \dots d k_d}{y - \sum_{j=1}^d r_j \cos k_j} \\ &= y \int_0^{\infty} \prod_{j=1}^d [e^{-\alpha y r_j} I_0(\alpha r_j)] d\alpha \quad (3.10) \end{aligned}$$

である。(9) は (2.34) すなわち orthorhombic lattice の格子 Green 関数に外ならない.

Kotera⁴⁶ は格子振動における localized mode の出現条件を random walk における returning probability α と $M < M \frac{1+\alpha}{2}$ で結びつけられることを示した.

§ 4. 格子振動の振動数スペクトラム ^{20-24, 47}

格子振動における振動数分布について考えよう。問題は regular lattice の問題, one impurity の問題, random に impurity の入っている時の問題, 等に分けられるがここでは第1及び第2の問題を考える。また one impurity の問題は mass だけ異なった場合と mass と force const が共に異なった場合に分けられ, また monatomic lattice, diatomic lattice ... という結晶構造による分類もある。求める量としては regular lattice の振動数分布のスペクトラム, localized mode 及び resonance mode の位置, これがあるときの全スペクトラム, 不純物付近の振幅の分布等がある。

先ず monatomic regular lattice を考える。原子の質量を M 。平衡位置が $\underline{n}$ にある原子の変位を $\underline{u}_{\underline{n}}$ とすると harmonic model において運動の energy 及びポテンシャルエネルギーは夫々

$$T = \frac{M}{2} \sum \dot{\underline{u}}_{\underline{n}}^2 = \frac{M}{2} \sum [(\dot{u}_{\underline{n}}^x)^2 + (\dot{u}_{\underline{n}}^y)^2 + (\dot{u}_{\underline{n}}^z)^2] \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{\underline{n}} \sum_{\Delta} K (\underline{u}_{\underline{n}} - \underline{u}_{\underline{n}+\Delta})^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\underline{n}} \sum_{\Delta} K (u_{\underline{n}}^x - u_{\underline{n}+\Delta}^x)^2 + K (u_{\underline{n}}^y - u_{\underline{n}+\Delta}^y)^2 + K (u_{\underline{n}}^z - u_{\underline{n}+\Delta}^z)^2 \end{aligned} \quad (4.2)$$

で与えられる。K は force constant である。(2)を一般化すれば

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\alpha\beta} K_{\alpha\beta} u_{\alpha}^{\alpha} u_{\beta}^{\beta} \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (4.3)$$

と書くことが出来る。nearest neighbor interaction の場合
 $K^{\alpha\beta} = 0$ ($\alpha \neq \beta$) と仮定すると
 においては変位の x, y, z 成分は独立であり、振動数分布は変
 位の x 成分のみが存在していると考えた場合の結果を 3 重に
 縮退させただけの結果となるので以下 u_{α}^x を u_{α} と記し、
 $u_{\alpha}^y = u_{\alpha}^z = 0$ とおくと運動方程式は

$$\begin{aligned} M \ddot{u}_{\alpha} &= - \frac{\partial V}{\partial u_{\alpha}} \\ &= \sum_{\Delta} K (u_{\alpha+\Delta} - u_{\alpha}) \\ &= \sum_{\Delta} K (u_{\alpha+\Delta} - 2u_{\alpha} + u_{\alpha-\Delta}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

ここで

$$u_{\alpha} = \phi_{\alpha} e^{i\omega t} \quad (4.5)$$

とおくと

$$\sum_{\Delta} K (\phi_{\alpha+\Delta} - \phi_{\alpha}) + M\omega^2 \phi_{\alpha} = 0 \quad (4.6)$$

が得られる。これは (2.5) と同じ形 即ち格子空間における
 Helmholtz 方程式と同じ形である。従って $\phi_{\alpha} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}}$ とおくと

$$M\omega^2 - M\omega^2(\mathbf{k}) = 0 \quad (4.7)$$

ここに

$$M\omega^2(k) = Kz - Kz \gamma(k) \quad (4.8)$$

$$\gamma(k) = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} e^{ik \cdot \Delta} \quad (4.9)$$

ただし (2.5) では $\phi_{n+\Delta} - 2\phi_n + \phi_{n+\Delta}$ は Schrödinger 方程式の kinetic energy の項に相当していたのに格子振動においては力の項に相当して居り $M\omega^2$ は energy ではなくて加速度に相当する項であることを注意しておく。従って格子振動における振動数分布は直に格子振動の Green 関数 $G^{(0)}(\omega^2)$ により

$$\frac{1}{\pi} \text{Im } G^{(0)}(\omega^2 - i\epsilon) \quad (4.10)$$

で与えられることがわかる。

$$G^{(0)}(\omega^2) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \frac{dk}{M\omega^2 - M\omega^2(k)} \quad (4.11)$$

である。

次に mass だけ異なった one impurity (mass を M_0 とする) が regular monatomic lattice の中にある場合を考えよう。運動方程式に (5) を入れたものは

$$\sum_{\Delta} K(\phi_{n+\Delta} - \phi_n) + M\omega^2 \phi_n = 0 \quad (n \neq 0) \quad (4.12)$$

$$\sum_{\Delta} K(\phi_{\Delta} - \phi_0) + M_0\omega^2 \phi_0 = 0 \quad (4.13)$$

で与えられるがこれはまとめて書くと

$$\sum_{\Delta} K(\phi_{n+\Delta} - \phi_n) + M\omega^2 \phi_n = \delta_{n,0} (M - M_0) \omega^2 \phi_0 \quad (4.14)$$

の形となる。これは原点に source $(M - M_0) \omega^2 \phi_0$ があると
きの Green function の式 (2.6) であるから解は直に

$$\phi_n = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{i k n}}{M\omega^2 - M\omega^2(k)} (M - M_0) \omega^2 \phi_0 \quad (4.15)$$

となる。ここで $n = 0$ とおくと

$$\frac{1}{\omega^2 (M - M_0)} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{M\omega^2 - M\omega^2(k)} = G^{(0)}(\omega^2, 0) \quad (4.16)$$

$\omega^2 > \omega^2(k)$ に解があればこれは localized mode の振動数を与える。sc, bcc に対しては、

あるから mass がある程度以上軽くなければ localized mode は出来ない。但し fcc では Horiguchi, Morita⁵ により示された
ように $G(E) \rightarrow \infty$ as $E \rightarrow 1$ であるのでほんの僅かでも軽い

impurity が入れれば localized mode が出来る。(T. Horiguchi, Ph. D. thesis)

impurity を摂動とみたとき全系に対する Green 関数は

(2.32) により $V = (M - M_0) \omega^2 \equiv \lambda \omega^2$ とし

$$G_{ns}(\omega^2) = G_{ns}^{(0)} + \frac{\lambda \omega^2 G_{no}^{(0)}(\omega^2) G_{os}^{(0)}(\omega^2)}{1 - \lambda \omega^2 G_{oo}^{(0)}(\omega^2)} \quad (4.17)$$

で与えられる。摂動系の振動数分布関数 $g(\omega^2)$ を求めておこう。

撮動系の Green 関数 G_{rs} は (2.22) より

$$G_{rs} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\phi_s^*(k) \phi_r(k)}{E - E_k} \quad (4.18)$$

である。(k は全系の固有状態)

$$g_{rs}(E) = \frac{1}{N} \sum_k \phi_s^*(k) \phi_r(k) \delta(E - E_k) \quad (4.19)$$

とおくと

$$G_{rs} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_{rs}(E)}{E - E'} dE' \quad (4.20)$$

が成立つ。全系の状態密度は

$$\begin{aligned} g(E) &= \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - E_k) \\ &= \frac{1}{N} \sum_r g_{rr}(E) \end{aligned} \quad (4.21)$$

であるから

$$\frac{1}{N} \text{Tr } G(E - i\epsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(E') dE'}{E - E'} + i\pi g(E) \quad (4.22)$$

故に

$$Ng(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im } \text{Tr } G(E - i\epsilon) \quad (4.23)$$

である。

(2.33) より

$$-\frac{d}{dE} G^{(0)} = \frac{1}{(E - H_0)^2} = G^{(0)} G^{(0)} \quad (4.24)$$

であるから

$$\sum G_{me}^{(0)} G_{en}^{(0)} = -\frac{d}{dE} G_{mn}^{(0)} \quad (4.25)$$

が成立つ。摂動が原点だけに作用している場合 (2.32) より

$$T_r G = T_r G^{(0)} + \frac{V}{1 - G_{oo}^{(0)} V} \sum_n G_{no}^{(0)} G_{on}^{(0)} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} &= T_r G^{(0)} - \frac{V}{1 - G_{oo}^{(0)} V} \frac{d}{dE} G_{oo}^{(0)} \\ &= T_r G^{(0)} + \frac{d}{dE} \ln (1 - V G_{oo}^{(0)}) \end{aligned} \quad (4.27)$$

これを (23) にいれると

$$g(E) = g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \operatorname{Im} \frac{V \frac{d}{dE} G_{oo}^{(0)}(E - i\epsilon)}{1 - V G_{oo}^{(0)}(E - i\epsilon)} \quad (4.28)$$

$$= g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \operatorname{Im} \frac{V \frac{d}{dE} \operatorname{Re} G_{oo}^{(0)}(E) + \frac{d}{dE} \operatorname{Im} G_{oo}^{(0)}(E)}{1 - V \operatorname{Re} G_{oo}^{(0)}(E) - i V \operatorname{Im} G_{oo}^{(0)}(E)} \quad (4.28')$$

$$= g_0(E)$$

$$- \frac{1}{\pi N} \frac{V^2 \left(\frac{d}{dE} \operatorname{Re} G_{oo}^{(0)}(E) \right) \operatorname{Im} G_{oo}^{(0)}(E) + V [1 - V \operatorname{Re} G_{oo}^{(0)}(E)] \left(\frac{d}{dE} \operatorname{Im} G_{oo}^{(0)}(E) \right)}{[1 - V \operatorname{Re} G_{oo}^{(0)}(E)]^2 + [V \operatorname{Im} G_{oo}^{(0)}(E)]^2} \quad (4.29)$$

第2項は impurity による状態密度への寄与を示す。これは

$$1 - V \operatorname{Re} G_{oo}^{(0)}(E) = 0 \quad (4.30)$$

に極大を有する。この E の値 E_0 を resonance point という。

$E = E_0$ の近くで $\text{Re } G_{00}^{(0)}(E)$ を展開すると

$$\text{Re } G_{00}^{(0)}(E) = \frac{1}{V} + F'(E_0)(E - E_0) + \dots \quad (4.31)$$

これを (29) にいれると

$$g(E) = g_0(E) + \frac{1}{\pi N} \frac{\Gamma_0(E)}{(E - E_0)^2 + \Gamma_0^2(E)} \quad (4.32)$$

ここに

$$\Gamma_0(E) = - \frac{\text{Im } G_{00}^{(0)}(E_0)}{F'(E_0)} \quad (4.33)$$

である。

ここで E_0 が band の外にある場合と中にある場合とに分けて考えよう。 E_0 が band の外にある場合は $G_{00}^{(0)}$ の imaginary part は存在しないから (28') の第 2 項に (31) をいれると

$$\begin{aligned} g(E) &= g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \text{Im} \frac{\frac{d}{dE} \text{Re } G_{00}^{(0)}(E)}{1 - V \text{Re } G_{00}^{(0)}(E)} \\ &= g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \text{Im} \frac{1}{E - E_0} \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$= g_0(E) - \frac{1}{N} \delta(E - E_0) \quad (4.35)$$

即ち separate discrete level が現れたわけでこれが localized

level である。この level に対する $\phi_n (= G_{n0}^{(0)})$ は impurity を離れるに従って急激に減衰する。

次に E_0 が band の中にあるときは $\Gamma_0(E_0)$ は有限で $E=E_0$ の近傍で状態密度は peak を持ちその幅は $\Gamma_0(E_0)$ で定められる。このときの $\phi_n = \text{impurity}$ を離れるに従い振動しながら弱い減衰をする。これを "virtual" level という。

なお精しくしらべると何れの場合も band の中にある値 $E=E_0$ において continuous spectrum に dip があらわれる。これを antiresonance point という。

K^{ab} が非対角要素をもつときは (16), (14) を波数空間で書くと左辺は $3N \times 3N$ の (3 は x, y, z の 3) 行列とベクトルの積となりこの固有方程式の固有値および固有ベクトルが振動数および polarization vector を与える。この行列を dynamical matrix という。⁴⁸

格子振動の問題を第二量子化により扱えば

$$G_{rs}^{ab}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [u_r^a(t), u_s^b(t')] \rangle \quad (4.36)$$

により 2 時間温度 Green 関数が定義されるがその時間 Fourier 変換は classical な格子 Green 関数と一致する。スペクトル定義により相関関数や平均値を計算するとき振動子が量子化された効果が入ってくる。

§ 5. diatomic lattice の格子振動²³

NaCl 型結晶の格子振動を考える。格子点 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ に対し $x+y+z = \text{even}, \text{odd}$ の各々に対し A 原子及び B 原子が存在するとしその mass を m_1, m_2 , 変位の x 成分を $u_{\mathbf{r}} \equiv \phi_{\mathbf{r}} e^{i\omega t}$, $v_{\mathbf{r}} = \psi_{\mathbf{r}} e^{i\omega t}$ とする. force const は一定とし K とする. regular lattice に対する運動方程式は

$$m_1 \ddot{u}_{\mathbf{r}} = \sum_{\Delta} K (v_{\mathbf{r}+\Delta} - u_{\mathbf{r}}) \quad (5.1)$$

$$m_2 \ddot{v}_{\mathbf{r}} = \sum_{\Delta} K (u_{\mathbf{r}+\Delta} - v_{\mathbf{r}}) \quad (5.2)$$

であるから

$$\sum_{\Delta} K (\phi_{\mathbf{r}+\Delta} - \psi_{\mathbf{r}}) + m_1 \omega^2 \psi_{\mathbf{r}} = 0 \quad (5.3)$$

$$\sum_{\Delta} K (\psi_{\mathbf{r}+\Delta} - \phi_{\mathbf{r}}) + m_2 \omega^2 \phi_{\mathbf{r}} = 0 \quad (5.4)$$

が成立つ

$$\phi_{\mathbf{r}} = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \psi_{\mathbf{r}} = B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (5.5)$$

をいれ

$$\sum_{\Delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta} = \gamma_{\mathbf{k}} \quad (5.6)$$

とおくと

$$K \gamma_{\mathbf{k}} A + (m_1 \omega^2 - \gamma_{\mathbf{k}} K) B = 0 \quad (5.7)$$

$$(m_2 \omega^2 - \gamma_{\mathbf{k}} K) A + K \gamma_{\mathbf{k}} B = 0 \quad (5.8)$$

(7)(8)より振動数 ω は

$$(m_1\omega^2 - \varepsilon K)(m_2\omega^2 - \varepsilon K) - K^2\varepsilon^2\gamma_k^2 = 0 \quad (5.9)$$

$$\omega^2 = \varepsilon K \frac{(m_1 + m_2) \pm \sqrt{(m_1 - m_2)^2 + 4m_1m_2\gamma_k^2}}{2m_1m_2} \quad (5.10)$$

により定まる。 $-1 < \gamma_k < 1$ であるのでエネルギー・スペクトラムは二つのバンドに分れ、その端は

$$\omega_1 = \varepsilon K \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \quad (5.11)$$

$$\omega_2 = \frac{\varepsilon K}{m_2} \quad (5.12)$$

$$\omega_3 = \varepsilon K \frac{1}{m_1} \quad (5.13)$$

$$\omega_4 = 0 \quad (5.14)$$

“ $\omega_1 > \omega > \omega_2$ の optical band, $\omega_3 > \omega > \omega_4$ の acoustical band” がある ($m_1 > m_2$ とした)。

いま

$$(m^*\omega^2 - K\varepsilon)^2 = (m_1\omega^2 - K\varepsilon)(m_2\omega^2 - K\varepsilon) \quad (5.15)$$

で定義される有効質量 m^* を定義すると (9) は

$$m^*\omega^2 = K\varepsilon \pm K\varepsilon\gamma(k) \quad (5.16)$$

となり monatomic の場合の (4.8) と等価となる。但し (15) の右辺は $\omega_2 > \omega > \omega_1$ で負となるので optical band と

acoustical band の gap においては $(m^*\omega^2 - Kz)^2 < 0$,
 であることを注意しておく。

次に diatomic lattice に対して mass だけ異なる one impurity problem
 を考える。原点に impurity があるとすると

$$\sum_{\Delta} K(\psi_{n+\Delta} - \phi_n) + m_1 \omega^2 \phi_n = (m_1 - M) \omega^2 \phi_0 \quad (5.17)$$

$$\sum_{\Delta} K(\phi_{n+\Delta} - \psi_n) + m_2 \omega^2 \psi_n = 0 \quad (5.17')$$

いま

$$\phi_n = \frac{1}{N} \sum A_k e^{ikn} \quad (5.18)$$

$$\psi_n = \frac{1}{N} \sum B_k e^{ikn} \quad (5.18')$$

とおくと

$$(m_1 \omega^2 - Kz) A_k + z K \gamma(k) B(k) = (m_1 - M) \omega^2 \phi_0 A_k \quad (5.19)$$

$$A_k K z \gamma(k) + (m_2 \omega^2 - Kz) B_k = 0 \quad (5.19')$$

故に

$$A_k = \frac{(m_2 \omega^2 - Kz)(m_1 - M) \omega^2 \phi_0}{(m^* \omega^2 - Kz)^2 - (Kz \gamma(k))^2} \quad (5.20)$$

$$B_k = - \frac{Kz \gamma(k)(m_1 - M) \omega^2 \phi_0}{(m^* \omega^2 - Kz)^2 - (Kz \gamma(k))^2} \quad (5.20')$$

(20) を (18) に入れ $\omega = 0$ とおくと

$$\begin{aligned} \frac{1}{(m_1 - M)\omega^2} &= \frac{1}{2} \frac{m_2 \omega^2 - Kz}{[m^* \omega^2 - Kz]} \left[\frac{1}{N} \sum \frac{1}{m^* \omega^2 - Kz - Kz\gamma(k)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{N} \sum \frac{1}{m^* \omega^2 - Kz + Kz\gamma(z)} \right] \\ &= \frac{1}{[(m_1 \omega^2 - Kz)(m_2 \omega^2 - Kz)]^{1/2}} \frac{1}{N} \sum \frac{1}{m^* \omega^2 - Kz - Kz\gamma(k)} \quad (5.21) \end{aligned}$$

が得られる。これが diatomic lattice の localized mode の振動数を定める式である。但し band gap にある localized mode に対しては $(m^* \omega^2 - Kz)^2 < 0$ であるから第1節の言葉で言えば energy が imaginary の場合の Green 関数が必要となる。この事情は Heisenberg model の反強磁性を扱う場合にもあらわれる。(18), (18'), (20), (20') より振動数, ω は Green 関数より求められる。

§ 6. 格子振動 — impurity の mass と force const が
共に変化している場合

次に monatomic lattice において force const と mass とが
共に異った impurity の存在する場合を考える. impurity の
位置を原点としその mass を M_0 , impurity と nearest neighbor
の間 a force const を K_0 とする. n を位置ベクトルとし振幅 ϕ_n
に対する方程式は mass と force const の host atom との差
を摂動と考えて右辺にもってくると

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta'} K (\phi_{n+\Delta'} - \phi_n) + M\omega^2 \phi_n \\ = \delta_{n0} \left\{ \sum_{\Delta'} (K - K_0) (\phi_{\Delta'} - \phi_0) + (M - M_0)\omega^2 \phi_0 \right\} \\ + \sum_{\Delta} \delta_{n\Delta} (K - K_0) (\phi_0 - \phi_{\Delta}) \end{aligned} \quad (6.1)$$

となる. これは原点に source ρ_0 , 点 Δ ($\Delta = 1, 2, \dots, Z$) に
source ρ_{Δ} , 但し

$$\rho_0 = \sum_{\Delta'} K (\phi_{\Delta'} - \phi_0) + \mu\omega^2 \phi_0 \quad (6.2)$$

$$\rho_{\Delta} = K (\phi_0 - \phi_{\Delta}) \quad (6.3)$$

$$K = K - K_0,$$

$$\mu = M - M_0.$$

があるときの定差波動方程式であるからその解 ϕ_n は ρ_0, ρ_Δ を用いて (ϕ_0, ϕ_Δ をパラメーターとして) 書き表わされる.

即ち

$$A_k = \frac{1}{M\omega^2 - \sum K(1 - \gamma_k)} \quad (6.4)$$

$$\gamma_k = \frac{1}{Z} \sum_{\Delta} e^{ik\Delta}$$

として

$$\begin{aligned} \phi_n &= \frac{1}{N} \sum_k A_k e^{ikn} \rho_0 \\ &\quad + \sum_{\Delta} \frac{1}{N} \sum_k A_k e^{ik(n-\Delta)} \rho_{\Delta} \end{aligned} \quad (6.5)$$

である. 無擾動系の Green 関数 $G_{mn}^{(0)}$

$$G_{nm}^{(0)} = \frac{1}{N} \sum_k A_k e^{-ikm + ikn} \quad (6.6)$$

を用いると

$$\begin{aligned} \phi_n &= \left[\sum_{\Delta'} K(\phi_{\Delta'} - \phi_0) + \mu\omega^2 \phi_0 \right] G_{n0}^{(0)} \\ &\quad + \sum_{\Delta'} K(\phi_0 - \phi_{\Delta'}) G_{n\Delta'}^{(0)} \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned} &= [(-\sum K + \mu\omega^2) G_{n0}^{(0)} + \sum_{\Delta'} K G_{n\Delta'}^{(0)}] \phi_0 \\ &\quad + \sum_{\Delta'} K (G_{n0}^{(0)} - G_{n\Delta'}^{(0)}) \phi_{\Delta'} \end{aligned} \quad (6.7')$$

ϕ_0, ϕ_Δ の $z+1$ 個の量が分ればすべての ϕ_n は分るがこれはまた $n=0, \Delta$ の $z+1$ 個の未知数を定める方程式でもある。その場合

$$\phi_n = \sum_m \sum_l G_{nm}^{(0)} V_{ml} \phi_l \quad (6.8)$$

$$\begin{aligned} V_{ml} = & (-zK + \mu\omega^2) \delta_{m0} \delta_{l0} \\ & + K(\delta_{m0} + \delta_{n0} - 2\delta_{m0} \delta_{n0}) \end{aligned} \quad (6.9)$$

と書ける。行列記法で

$$\Phi = G^{(0)} \mathbb{V} \Phi \quad (6.10)$$

である。(10) が恒等的に 0 でない解を持つ為には

$$\det [\mathbb{1} - G^{(0)} \mathbb{V}] = 0 \quad (6.11)$$

でこれにより localized mode の振動数が定まる。また全系の Green 関数は (2.32) により

$$G = \frac{1}{\mathbb{1} - G^{(0)} \mathbb{V}} G^{(0)} \quad (6.12)$$

により定まる。

(10) の explicit な形を書いてみると

$$\begin{bmatrix} \phi_{-1} \\ \phi_0 \\ \phi_1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \kappa (G_{T0}^{(0)} - G_{TT}^{(0)}) & (-2\kappa + \mu\omega^2) G_{T0}^{(0)} + \kappa \sum_{\Delta'} G_{T\Delta'}^{(0)} & \kappa (G_{T0}^{(0)} - G_{T1}^{(0)}) \\ \kappa (G_{00}^{(0)} - G_{0T}^{(0)}) & (-2\kappa + \mu\omega^2) G_{00}^{(0)} + \kappa \sum_{\Delta'} G_{0\Delta'}^{(0)} & \kappa (G_{00}^{(0)} - G_{01}^{(0)}) \\ \kappa (G_{10}^{(0)} - G_{1T}^{(0)}) & (-2\kappa + \mu\omega^2) G_{10}^{(0)} + \kappa \sum_{\Delta'} G_{1\Delta'}^{(0)} & \kappa (G_{10}^{(0)} - G_{11}^{(0)}) \end{bmatrix}$$

$$\times \begin{bmatrix} \phi_{-1} \\ \phi_0 \\ \phi_1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} G_{TT}^{(0)} & G_{T0}^{(0)} & G_{T1}^{(0)} \\ G_{0T}^{(0)} & G_{00}^{(0)} & G_{01}^{(0)} \\ G_{1T}^{(0)} & G_{10}^{(0)} & G_{11}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\kappa & \kappa & 0 \\ \kappa & -2\kappa + \mu\omega^2 & \kappa \\ 0 & \kappa & -\kappa \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{-1} \\ \phi_0 \\ \phi_1 \end{bmatrix} = G \mathbb{W} \phi \quad (6.13)$$

3次元単純立方格子の場合は

$$G = \begin{matrix} & \begin{matrix} 000 & 100 & \bar{1}00 & 010 & 0\bar{1}0 & 001 & 00\bar{1} \end{matrix} \\ \begin{matrix} 000 \\ 100 \\ \bar{1}00 \\ 010 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \\ 00\bar{1} \end{matrix} & \left[\begin{array}{ccccccc} G_{000} & G_{\bar{1}00} & G_{100} & G_{0\bar{1}0} & G_{010} & G_{00\bar{1}} & G_{001} \\ G_{100} & G_{000} & G_{200} & G_{1\bar{1}0} & G_{110} & G_{10\bar{1}} & G_{101} \\ G_{\bar{1}00} & G_{\bar{2}00} & G_{000} & G_{\bar{1}\bar{1}0} & G_{\bar{1}10} & G_{\bar{1}0\bar{1}} & G_{\bar{1}01} \\ G_{010} & G_{0\bar{1}0} & G_{110} & G_{000} & G_{020} & G_{01\bar{1}} & G_{011} \\ G_{0\bar{1}0} & G_{0\bar{1}\bar{1}0} & G_{1\bar{1}0} & G_{0\bar{2}0} & G_{000} & G_{0\bar{1}\bar{1}} & G_{0\bar{1}1} \\ G_{001} & G_{\bar{1}01} & G_{101} & G_{0\bar{1}1} & G_{011} & G_{000} & G_{002} \\ G_{00\bar{1}} & G_{\bar{1}0\bar{1}} & G_{10\bar{1}} & G_{0\bar{1}\bar{1}} & G_{01\bar{1}} & G_{002} & G_{000} \end{array} \right] \end{matrix}$$

$$= \begin{bmatrix} g_0 & g_1 & g_1 & g_1 & g_1 & g_1 & g_1 \\ g_1 & g_0 & g_2 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} \\ g_1 & g_2 & g_0 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} \\ g_1 & g_{11} & g_{11} & g_0 & g_2 & g_{11} & g_{11} \\ g_1 & g_{11} & g_{11} & g_2 & g_0 & g_{11} & g_{11} \\ g_1 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_0 & g_2 \\ g_1 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_2 & g_0 \end{bmatrix}$$

(6.14)

$$V = \begin{matrix} & \begin{matrix} 000 & 100 & T00 & 010 & 0T0 & 001 & 00\bar{1} \end{matrix} \\ \begin{matrix} 000 \\ 100 \\ T00 \\ 010 \\ 0T0 \\ 001 \\ 00\bar{1} \end{matrix} & \left[\begin{array}{ccccccc} -ZK + M\omega^2 & K & K & K & K & K & K \\ K & -K & & & & & \\ K & & -K & & & & \\ K & & & -K & & & \\ K & & & & -K & & \\ K & & & & & -K & \\ K & & & & & & -K \end{array} \right] \end{matrix} \quad (6.15)$$

= = 1K

$$g_0 = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{dk_x dk_y dk_z}{M\omega^2 - ZK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \quad (6.16)$$

$$g_1 = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\cos k_x dk_x dk_y dk_z}{M\omega^2 - ZK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \quad (6.17)$$

$$g_2 = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\cos 2k_x dk_x dk_y dk_z}{M\omega^2 - ZK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \quad (6.18)$$

$$g_{11} = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\cos k_x \cos k_y dk_x dk_y dk_z}{M\omega^2 - ZK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \quad (6.19)$$

である。G, V は何れも

$$A = \begin{bmatrix} \epsilon & \beta & \beta & \beta & \beta & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \gamma & \delta & \delta & \delta & \delta \\ \beta & \gamma & \alpha & \delta & \delta & \delta & \delta \\ \beta & \delta & \delta & \alpha & \gamma & \delta & \delta \\ \beta & \delta & \delta & \gamma & \alpha & \delta & \delta \\ \beta & \delta & \delta & \delta & \delta & \alpha & \gamma \\ \beta & \delta & \delta & \delta & \delta & \gamma & \alpha \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

の形をしている。(20)は

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & b & 0 & 0 & a & d \\ 0 & a & -b & 0 & 0 & 0 & d \\ 0 & a & 0 & b & 0 & c & e \\ 0 & a & 0 & -b & 0 & c & e \\ 0 & a & 0 & 0 & b & -c & e \\ 0 & a & 0 & 0 & -b & -c & e \end{bmatrix} \quad (6.21)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{6}} \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad c = \frac{1}{\sqrt{4}} \quad d = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad e = -\frac{1}{\sqrt{12}} \quad (6.22)$$

unitary 変換 $S^{-1}AS$ により block diagonalize 出来る。

$$a^2 + b^2 + d^2 = 1, \quad a^2 + b^2 + c^2 + e^2 = 1$$

$$a^2 + de = 0, \quad a^2 - b^2 + d^2 = 0 \quad a^2 - c^2 + e^2 = 0$$

$$a^2 - b^2 + c^2 + e^2 = 0 \quad (6.23)$$

に注意すると

$$S^{-1}AS = \begin{bmatrix} \epsilon & \sqrt{6}\beta & & & & \\ \sqrt{6}\beta & \alpha + \gamma + 4\delta & & & & \\ & & \alpha - \gamma & & & \\ & & & \alpha - \gamma & & \\ & & & & \alpha - \gamma & \\ & & & & & \alpha + \gamma - 2\delta \\ & & & & & & \alpha + \gamma - 2\delta \end{bmatrix} \quad (6.24)$$

$$S^{-1}\Phi = \begin{bmatrix} \phi_{000} \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_{100} + \phi_{\bar{1}00} + \phi_{010} + \phi_{0\bar{1}0} + \phi_{001} + \phi_{00\bar{1}}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{100} - \phi_{\bar{1}00}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{010} - \phi_{0\bar{1}0}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{001} - \phi_{00\bar{1}}) \\ \frac{1}{2}(\phi_{010} + \phi_{0\bar{1}0} - \phi_{001} - \phi_{00\bar{1}}) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\phi_{100} + \phi_{\bar{1}00}) - \frac{1}{\sqrt{12}}(\phi_{010} + \phi_{0\bar{1}0} + \phi_{001} + \phi_{00\bar{1}}) \end{bmatrix} \quad (6.25)$$

最初の2行が S-like state, 次の3行が p-like state, 最後の2行が d-like state である。

(14)(15)と(20)に入れて(24)を作ると

$$\det \left\{ \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} g_0 & \sqrt{6}g_1 \\ \sqrt{6}g_1 & g_0 + g_1 + 4g_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\kappa + \mu\omega^2 & \sqrt{6}\kappa \\ \sqrt{6}\kappa & -\kappa \end{bmatrix} \right\} = 0 \quad (6.26)$$

$$[1 + K(q_0 - q_2)]^3 = 0 \quad (6.27)$$

$$[1 + K(q_0 + q_2 - 2q_1)]^2 = 0 \quad (6.28)$$

の 3 つに factorize される。これより localized mode の frequency が定まる。

§ 7. 強磁性及び反強磁性に対する paramagnetic and staggered susceptibility

$S = \frac{1}{2}$ の強磁性又は反強磁性、Heisenberg 模型 ²⁵⁻²⁹

但し後者については主として T_N のみである。

また反強磁性の場合格子 λ の同平 λ である。

けられるものとし spin lattice に対して磁場 H の向いにかか

った場合と反対の向いにかかると場合 (staggered field) を出束

が staggered field の場合)。この系に対する

Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = -2J \sum_f \cdot \sum_m - g\mu H e^{i(\frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{2})f} \sum_f S_f^z \quad (17)$$

$$= -\frac{1}{4} z N J - \frac{1}{2} g\mu H N - \sum_f \sum_m J(f-m) b_f^\dagger b_m$$

$$+ (zJ + g\mu H e^{i(\frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{2})f}) \sum_f b_f^\dagger b_i$$

$$\sum_f \sum_m J(f-m) b_i b_f b_m b_m$$

のように書き表わされる。ここに f, m は格子点 i, b_i

Pauli operator で表わされる格子点に対しては可換。同じ格子点

に対しては反可換で Bose 演算子と Fermi 演算子の中間の性質

を持つ。J は交換相互作用で、最近接格子点間の相互作用

のみを考えると

$$J(f-m) = J\delta_{f, m+\Delta} \quad (7.3)$$

(Δ は最近接格子ベクトル)で $J > 0$ なら強磁性的, $J < 0$ なら反強磁性的である。

いま A, B を二つの operator としその Heisenberg 表示を $A(t), B(t)$ とするとき

$$G_{AB}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_- \rangle \quad (7.4)$$

を演算子 A, B に対する 2 時間温度 Green 関数という。

$G_{AB}(t)$ の運動方程式の Fourier 変換より

$$EG_{AB}(E) = \langle [A, B]_- \rangle + G_{[A, H], B} \quad (7.5)$$

が得られる。 $G_{[A, H], B}$ は $[A, H]$ と B との Green 関数で G_{AB} を知るためには $G_{[A, H], B}$ を知らなければならぬが、これを適当に G_{AB} で近似すると G_{AB} に対する閉じた方程式となりとくことが出来る。

いま

$$A = b_g, \quad B = b_f^\dagger \quad (7.6)$$

とおいて G_{AB} を G_{gf} と書くこととし、(5)を作ると、

$$EG_{gf} = \delta_{gf} \langle (1 - 2n_f) \rangle - J \sum G_{g+\Delta, f^\dagger}$$

$$\begin{aligned}
& + (2J + g\mu H e^{i(g-f)(\frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{2})}) G_{gf^+} + 2J \sum G_{g^+, g, g+\Delta; f^+} \\
& - 2J \sum G_{g+\Delta^+, g+\Delta, g; f^+}
\end{aligned} \quad (7.7)$$

が得られる。右辺の第1項は Pauli operator の Fermi 的な性格からあらわれた項である。第4項と第5項における高次の Green 関数に対して

$$G_{p+pg; f^+} = \bar{n}_p G_{gf^+} \quad (\bar{n}_p = \langle b_p^+ b_p \rangle) \quad (7.8)$$

と近似する (Tjablikov 近似)²⁵。

まず強磁性の場合を考える。(8)と

$$G_{gf}(E) = \frac{1}{N} \sum_k G_k(E) e^{i(g-f) \cdot k} \quad (7.9)$$

と (7) に代入し $\sum_{\Delta}$ を行い $G_k(E) = \frac{\sigma}{E - E_k}$ が求められる。(これ)

$$G_{gf} = \sigma \frac{1}{N} \sum \frac{e^{i(g-f) \cdot k}}{E - E_k} \quad (7.10)$$

$$\sigma = 1 - 2\bar{n} = M / \frac{1}{2} g\mu. \quad (\text{normalize された磁化}) \quad (7.11)$$

$$E_k = g\mu H + 2J\sigma E_0(k) \quad (7.12)$$

$$E_0(k) = \frac{z}{2} (1 - \gamma(k)) \quad (7.13)$$

$$\gamma(k) = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} e^{i k \cdot \Delta} \quad (7.14)$$

が得られる。即ち Heisenberg 模型の 2 時間温度 Green 関数の
時間 Fourier 変換は格子 Green 関数の $\sigma = (1 - 2\pi)$ 倍である。
この因子 $(1 - 2\pi)$ は Pauli operator の Fermi 的性格にともな
う。

(10) の G_{gf} より $b_f^\dagger b_g$ の相関関数はスペクトル定理を用いて

$$\begin{aligned} \langle b_f^\dagger(t') b_g(t) \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE(t-t')} \\ &\times \frac{i}{e^{\beta\omega} - 1} [G_{gf}(E + i\epsilon) - G_{gf}(E - i\epsilon)] \end{aligned} \quad (7.15)$$

$$= \frac{1}{N} \sum e^{i(g-f) \cdot k - iE_k(t-t')} \frac{1 - 2\pi}{e^{\beta E_k} - 1} \quad (7.16)$$

のように求まる。ここで $t = t'$, $f = g$ とすると

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum \coth \frac{\beta E_k}{2} \quad (7.17)$$

が得られる。(3) は温度と磁場の関数として磁化を定める
関係式である。

次に $T > T_N$ における反強磁性を考える。(7), (8) を入れ
ると

$$i \langle \sigma_f \sigma_g \rangle = g \mu_B e^{i(g-f)(\frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{2})} \langle \sigma_f \rangle + \sigma_g J \sum G_{g+\Delta, f} = \delta_{gf} \sigma_f \quad (7.18)$$

ここで、 σ は格子点とし、 f の s sublattice s (same
s) とし、 Δ は sublattice d (different d) にあいて G_{gf} の
Fourier 変換 $G_{1\lambda}(E)$, $G_{2\lambda}(E)$ を作る。

$$G_{1\lambda} = \sum_{\text{same}}^{N/2} G_{gf} e^{-i(g-f)\lambda} \quad (7.19)$$

$$G_{2\lambda} = \sum_{\text{diff}}^{N/2} G_{gf} e^{-i(g-f)\lambda} \quad (7.20)$$

(19)(20)の $\sum$ は夫々 g, f が同じ sublattice 上にある場合及び異なる sublattice 上にある場合についての $N/2$ 個についての和である。(18)に対して $\sum_{\text{same sublattice}} e^{-i(g-f)\lambda}$, $\sum_{\text{different sublattice}} e^{-i(g-f)\lambda}$ を operate する。

$$(E - \Sigma J \sigma_2 - gMH)G_{1\lambda} + \sigma_1 J \Sigma \gamma_\lambda G_{2\lambda} = \sigma_1 \quad (7.21)$$

$$(E - \Sigma J \sigma_1 \mp gMH)G_{2\lambda} + \sigma_2 J \Sigma \gamma_\lambda G_{1\lambda} = 0 \quad (7.22)$$

ここに複号上号は ordinary field に、下号は staggered field に対応するものである。(21)(22)をたとく $G_{1\lambda}$ は

$$G_{1\lambda} = \frac{\sigma_1}{E_1 - E_2} \left[\frac{E_1 - \Sigma J \sigma_1 - gMH}{E - E_1} - \frac{E_2 - \Sigma J \sigma_1 - gMH}{E - E_2} \right] \quad (7.23)$$

ここに $E_{1,2}$ は ordinary field に対して

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \{ \Sigma J (\sigma_1 + \sigma_2) + 2gMH \pm [\Sigma^2 J^2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4\sigma_1 \sigma_2 (\Sigma \gamma)^2 \gamma_\lambda^2]^{1/2} \} \quad (7.24)$$

staggered field に対して

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \{ \Sigma J (\sigma_1 + \sigma_2) \pm [\Sigma^2 J^2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2 - 4J \Sigma gMH (\sigma_1 - \sigma_2) + 4(gMH)^2 + 4\sigma_1 \sigma_2 (\Sigma \gamma)^2 \gamma_\lambda^2]^{1/2} \} \quad (7.25)$$

である。

いま ordinary field については f, g が同じ sublattice 上にあるときは

$$\langle b_f^\dagger b_g \rangle = \frac{1-\sigma}{2} = \frac{2\sigma_1}{N} - \sum_{\lambda} \frac{e^{2(g-f)\lambda}}{E_1 - E_2} \left[\frac{E_1 - zJ_{11}\sigma_1 - g\mu H}{e^{\beta E_1} - 1} - \frac{E_2 - zJ_{11}\sigma_1 - g\mu H}{e^{\beta E_2} - 1} \right] \quad (7.26)$$

(26) に (24) を入れて整理すると f site のある sublattice の magnetization σ_1 は

$$\frac{1}{\sigma_1} = \frac{2}{N} \sum_{\lambda}^{N/2} \frac{\sinh A - F \sinh B}{\cosh A - \cosh B} \quad (7.27)$$

ここに

$$A = \beta [g\mu H + \frac{z}{2} J_{11} (\sigma_1 + \sigma_2)] \quad (7.28)$$

$$B = \frac{\beta}{2} [z^2 J_{11}^2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4 J_1^2 \sigma_1 \sigma_2 z^2 \gamma_{\lambda}^2]^{1/2} \quad (7.29)$$

$$F = \frac{z J_{11} (\sigma_1 - \sigma_2)}{[z^2 J_{11}^2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4 J_1^2 \sigma_1 \sigma_2 z^2 \gamma_{\lambda}^2]^{1/2}} \quad (7.30)$$

同様に他の sublattice の部分磁化は

$$\frac{1}{\sigma_2} = \frac{2}{N} \sum_{\lambda}^{N/2} \frac{\sinh A + F \sinh B}{\cosh A - \cosh B} \quad (7.31)$$

(27) と (31) を連立させてとけば σ_1, σ_2 を H, β の函数として求めることが出来る。(27) (31) は H の如何に拘らず $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ の解を有する。このとき

$$A = \beta (g\mu H + \sum J_{\parallel} \sigma) \quad (7.32)$$

$$B = \beta \sum J_{\perp} \gamma_{\lambda} \quad (7.33)$$

$$F = 0 \quad (7.34)$$

2"

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{2}{N} \sum_{\lambda}^{N/2} \frac{\sinh A}{\cosh A - \cosh B} = \frac{2}{N} \sum_{\lambda} \frac{1}{2} \left(\coth \frac{A-B}{2} + \coth \frac{A+B}{2} \right) \quad (7.35)$$

第1項、第2項は等しい値を与えるから

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{2}{N} \sum_{\lambda}^{N/2} \coth \frac{\beta}{2} [g\mu H + \sum J_{\parallel} \sigma (1 - \gamma_{\lambda})] \quad (7.36)$$

反強磁性体のパウ領域における σ と H の関係を与える式で
これは対応する強磁性の場合の式と同じ形である。
^

§ 8. 強磁性及び反強磁性の Heisenberg 模型 (つづき)

先ず強磁性 (17) および反強磁性の ordinary field (36) を考える.

いま $T > T_c$ 又は $T > T_N$ を考え $\bar{\chi} \equiv 2\sigma / gMH$ (normalized susceptibility) 一定として $\sigma \rightarrow 0$, $H \rightarrow 0$ の極限をとると $\coth x$ の展開の第1項のみとてよいから (17), (36) より

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k^N \frac{2}{\beta E_k} \quad (8.1)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k^N \frac{1}{\beta} \frac{1}{gMH + J\sigma z(1 - \gamma_k)} \quad (8.2)$$

すなわち

$$J\beta = \frac{1}{N} \sum_k^N \frac{1}{\frac{gMH}{2J\sigma} + \frac{z}{2}(1 - \gamma_k)} \quad (8.3)$$

$$= -G(-1/J\bar{\chi}) \quad (8.4)$$

を得る. ここに $G(E)$ は原点における band の外の energy の値に対する格子グリーン関数の実数部である. band の外における $G(E)$ の逆関数を $G^{-1}(x)$ と記すと帯磁率 $\bar{\chi}$ は

$$\bar{\chi} = -1/JG^{-1}(-J\beta) \quad (8.5)$$

で与えられる。即ち

$$\frac{1}{\chi} = J [I_{sc}^{-1} (J\beta) - 3] \quad sc \quad (8.6a)$$

$$= 4J [I_{bcc}^{-1} (4J\beta) - 1] \quad bcc \quad (8.6b)$$

$$= 2J [I_{fcc}^{-1} (2J\beta) - 3] \quad fcc \quad (8.6c)$$

である。 $J > 0$ で強磁性、 $J < 0$ で反強磁性であるので (6) より強、反強磁性の場合の高温帯磁率が求められる。^(Katsuma, Matsubara²⁹) $I_{sc} (|S| > 3)$, $I_{bcc} (|S| > 1)$; $I_{fcc} (S > 3)$ に対しては Mannari Kawabata¹⁸ または Morita Horiguchi¹² の表により, $I_{fcc} (S < -1)$ に対しては (反強磁性の場合必要) Morita Horiguchi¹² の表により数値が与えられてある。 sc と bcc に対しては $T_c = T_N$,

$\bar{\chi}_{AF}(T_N) = 1/2|J|$ であるが fcc に対しては $T_c \neq T_N$, $T_N = 0$, $\bar{\chi}_{AF}(T_N) = 1/8|J|$ である。 fcc に対して T_N が 0 であることは LGF の real part が $S = -1$ で発散することと結びついている。但し第2近接相互作用が存在すれば、この発散はなくなり Néel 温度は一般に有限となる。

次に反強磁性の staggered field の場合を考える。

$$\sigma_1 = -\sigma_2 \quad \text{と} \quad (7.25) \quad \text{より}$$

$$E_{1,2} = \pm \{ z^2 J^2 \sigma_1^2 - 2Jz gMH \sigma_1 + (gMH)^2 - \sigma_1^2 (Jz)^2 \gamma_\lambda^2 \}^{1/2} \quad (8.7)$$

spectral theorem より $\langle b_g^\dagger b_f \rangle$ を求め $f = g$ とすると

$$\begin{aligned} \langle b_f^\dagger b_f \rangle &= \bar{n} = \frac{1 - \sigma_1}{2} \\ &= \frac{2}{N} \sum \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sigma_1 \frac{E - zJ\sigma_1 + gMH}{E_1 - E_2} \frac{1}{e^{\beta E} - 1} (\delta(E - E_1) - \delta(E - E_2)) \end{aligned} \quad (8.8)$$

これより

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma_1} &= \frac{2}{N} \sum \frac{1}{2} \left(\frac{E_1}{E_1 - E_2} \operatorname{cth} \frac{\beta E_1}{2} - \frac{E_2}{E_1 - E_2} \operatorname{cth} \frac{\beta E_2}{2} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{gMH - zJ\sigma_1}{E_1 - E_2} \left(\operatorname{cth} \frac{\beta E_1}{2} - \operatorname{cth} \frac{\beta E_2}{2} \right) \end{aligned} \quad (8.9)$$

$H \rightarrow 0$, $\sigma \rightarrow 0$ とする. $E = 0$ (σ) であるから $0(E)$ までとる

$$\frac{1}{\sigma_1} = \frac{2}{N} \sum \frac{1}{2} \frac{-zJ\sigma_1 + gMH}{E_1 - E_2} \left(\frac{2}{\beta E_1} - \frac{2}{\beta E_2} \right) \quad (8.10)$$

$$= \frac{2}{N} \sum \frac{2(-gMH + zJ\sigma_1)}{\beta E_1 E_2} \quad (8.11)$$

故に

$$-J\beta = \frac{2}{N} \sum^{N/2} \frac{2 \left(1 - \frac{gMH}{zJ\sigma} \right)}{\left(1 - \frac{gMH}{zJ\sigma} \right)^2 - \gamma_\lambda^2} \quad (8.12)$$

$$= \frac{2}{N} \sum^{N/2} \frac{2}{1 - \frac{gMH}{zJ\sigma} - \gamma_\lambda} \quad (8.13)$$

$$J\beta = G \left(1 / J \bar{\chi}_s \right) \quad (8.14)$$

ここに $\bar{\chi}_s$ は normalized staggered susceptibility

$$\bar{\chi}_s \equiv \lim_{H \rightarrow 0} \frac{2\sigma}{gMH} \quad (8.15)$$

(14)において $J < 0$ であるから

である。これは (4) 式と等価である。即ち反強磁性の

staggered susceptibility は Tjablikov 近似においては強磁性の paramagnetic susceptibility と等しい。Néel 点、は Curie 点と等しく、 $T = T_N$ で $\bar{\chi}_s$ は発散する。(これは sc, bcc 等のこと、fcc は除く)。

次に $T < T_N$ を考えると spontaneous staggered sublattice magnetization は spontaneous ordinary sublattice magnetization に等しいことを証明することになる。磁場が存在すれば勿論この2つは異なるので ordinary case では critical field が存在するが staggered case では critical field が存在しない。

antiferromagnet

要するに staggered Λ というものは一つの sublattice だけ見れば³⁰ 殆んど ferro と似ているので staggered Ising antiferro の状態和の根の分布も単位円上にあるのも怪しむに足りない。但し近似を上げれば ferro の T_c の値と staggered の T_N の値とは一般に異ってくるであろう。

Mubayi³¹, Lange³², Oguchi³³, Shimizu³³ はある近似において二次元強磁性 Heisenberg において Stanley-Kaplan 型³¹ phase change を導いた ($T \rightarrow T_c$ で $\chi \rightarrow \infty$, $T < T_c$ で $\sigma = 0$)

staggered antiferro は ferro like のものであるからこれと同じ近似において二次元では Stanley-Kaplan 型³¹ phase change が生ずるのも当然であろう。 (Oguchi, preprint)³⁴

§ 9. Heisenberg 模型における二体問題と Bound state

§ 2 のべたように orthorhombic lattice の一体 Green 関数は simple cubic lattice の二体 Green 関数である。このことを強磁性の Heisenberg model に対する bound state の問題として説明しよう。最近接相互作用をする $S = \frac{1}{2}$ のスピンの Hamiltonian は

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{i,j} S_i S_j + NzJS^2 \\ &= -J \sum_j \sum_{\Delta} \left\{ S_j^z S_{j+\Delta}^z + S_j^+ S_{j+\Delta}^- \right\} + NzJS^2 \end{aligned} \quad (9.1)$$

とする。 $\underline{J}^2$ ($\underline{J} = \sum \underline{S}_j$) と J^2 は運動の定数である。

結晶格子は単純立方格子とする。 spin deviation number operator

$$n = NS + \sum_i S_i^z \quad (9.2)$$

は Hamiltonian と可換である。

状態 $|0\rangle$ をもって

$$S_j^- |0\rangle = 0 \quad (9.3)$$

であるような全体の向きのこと、た normalize された状態とする。 $|0\rangle$ は H, J, n の固有函数である。(z は最近接格子点の数)。 (1) の第 2 項の $NzJS^2$ は

$$H|0\rangle = 0 \quad (9.4)$$

ならしめるよう付け加えておいたのである。

$|0\rangle$ に S_j^+ を 1 回作用させると $n=1$ の部分空間が出る。
これを $|j>_0$ と書こう ($S_j^+|0\rangle = |j>_0$)。 $|j>_0$ の Fourier 交換により spin wave state $|\lambda\rangle$ を定義すると

$$|\lambda\rangle = N^{-\frac{1}{2}} \sum_j \exp(i\lambda j) |j>_0 \quad (9.5)$$

$[H, S_j^+]$ を作ると

$$[H, S_j^+] = 2J \sum_{\Delta} (S_{j+\Delta}^+ S_j^z - S_j^+ S_{j+\Delta}^z) \quad (9.6)$$

故に

$$\begin{aligned} H|j>_0 &= [H, S_j^+]|0> + S_j^+ H|0> \\ &= [H, S_j^+]|0> \end{aligned} \quad (9.7)$$

(6) を入れて

$$= 2J \sum S_j^z |j+\Delta> - 2J \sum S_{j+\Delta}^z |j> \quad (9.7')$$

$S_j^z = \frac{1}{2} - S_j^- S_j^+$ であるから

$$S_j^z |i> = \frac{1}{2} |i> - |i> = -\frac{1}{2} |i> \quad (i \neq j) \quad (9.8)$$

で

$$(7') = J \sum_{\Delta} [|j> - |j+\Delta>] \quad (9.9)$$

従って

$$\begin{aligned}
 H|\lambda\rangle &= N^{-\frac{1}{2}} J \sum_j \sum_{\Delta} \exp(i\lambda_j) [|\mathbf{j}\rangle - |\mathbf{j}+\Delta\rangle] \\
 &= J \left[z - \sum_{\Delta}^6 \cos(\lambda\Delta) \right] |\lambda\rangle
 \end{aligned}
 \quad (9.10)$$

即ち, spin wave state $|\lambda\rangle$ は H の固有函数でその固有値は

$$E_{\lambda} = J \left[z - \sum_{\Delta}^6 \cos(\lambda\Delta) \right] \quad (9.11)$$

である。

$n=2$ の normalized eigenstate Ξ

$$\Xi = \sum_{i,j} U(i,j) S_i^+ S_j^+ |0\rangle = \sum_{i,j} U(i,j) |ij\rangle \quad (9.12)$$

$$U(i,j) = U(j,i)$$

と書き係数 $U(i,j)$ を求めよう。 $S = \frac{1}{2}$ に対しては, $U(i,i)$ は定義されていない。

two spin deviation state Ξ

$$|jk\rangle = S_j^+ S_k |0\rangle \quad (|ij\rangle = |ji\rangle, |ii\rangle = 0)$$

とする。

$$\langle ij | ij \rangle = 1 - \delta(i,j) \quad (9.13)$$

状態 $|jk\rangle$ に対して H を作用させると

$$H|jk\rangle = H S_j^+ S_k |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= [HS_j^+, S_k^+] |0\rangle + S_k^+ HS_j^+ |0\rangle \\
&= [[H, S_j^+], S_k^+] |0\rangle + [S_j^+ H, S_k^+] |0\rangle \\
&\quad + S_k^+ [H, S_j^+] |0\rangle + S_k^+ S_j^+ H |0\rangle \quad (9.14)
\end{aligned}$$

(14) の右辺第2項は

$$[S_j^+ H, S_k^+] |0\rangle = S_j^+ [H, S_k^+] |0\rangle \quad (9.15)$$

である。(15) を考慮して

$$H |j, k\rangle = S_k^+ [H, S_j^+] |0\rangle + S_j^+ [H, S_k^+] |0\rangle + [[H, S_j^+], S_k^+] |0\rangle \quad (9.16)$$

右辺第1項と第2項は one spin deviation の場合と同様に Fourier 変換を利用して対角化できる。第3項が spin wave の相互作用の energy である。この commutator は

$$\begin{aligned}
[[H, S_j^+], S_k^+] &= 2J \sum_{\Delta} (S_{j+\Delta}^+ S_j^z - S_j^+ S_{j+\Delta}^z) S_k^+ \\
&\quad - 2J S_k^+ \sum_{\Delta} (S_{j+\Delta}^+ S_j^z - S_j^+ S_{j+\Delta}^z) \\
&= 2J \sum_{\Delta} \{ \delta_{jk} S_{j+\Delta}^+ [S_j^z, S_j^+] - \delta_{j+\Delta, k} S_j^+ [S_{j+\Delta}^z, S_{j+\Delta}^+] \} \\
&= 2J \sum_{\Delta} (\delta_{jk} - \delta_{j+\Delta, k}) S_j^+ S_{j+\Delta}^+ \quad (9.17)
\end{aligned}$$

$$\Phi = \sum_{i,j} \cup (i, j) |i, j\rangle \quad (9.18)$$

が $n=2$ の空間]における H の固有函数になるよう $U(i, j)$ を定めよう. その固有値を E とすると $H\Phi = E\Phi$ より

$$\sum_{ij} U(i, j) \{ S_i^+ [H, S_j^+] |0\rangle + S_j^+ [H, S_i^+] |0\rangle + 2J \sum_{\Delta} (\delta_{ij} - \delta_{i+\Delta, j}) S_i^+ S_{i+\Delta}^+ |0\rangle - E S_i^+ S_j^+ \} |0\rangle = 0 \quad (9.19)$$

{ } 内第1項, 第2項に対しては(7)(9)を用い

$$\sum_{ij} U(i, j) \{ S_i^+ \sum_{\Delta} (S_j^+ - S_{j+\Delta}^+) + S_j^+ \sum_{\Delta} (S_i^+ - S_{i+\Delta}^+) + 2 \sum_{\Delta} (\delta_{ij} - \delta_{i+\Delta, j}) S_i^+ S_{i+\Delta}^+ - E S_i^+ S_j^+ \} |0\rangle = 0 \quad (9.20)$$

(20) の { } 内第3項を変形する.

$$\begin{aligned} & \sum_{ij} U(i, j) 2 \sum_{\Delta} (\delta_{ij} - \delta_{i+\Delta, j}) S_i^+ S_{i+\Delta}^+ |0\rangle \\ &= \sum_{ijk} U(i, k) 2 \sum_{\Delta} (\delta_{ik} - \delta_{i+\Delta, k}) \delta_{i+\Delta, j} S_i^+ S_j^+ |0\rangle \end{aligned}$$

$\sum_k$ を行つて

$$= \sum_{ij} [U(i, i) 2 \sum_{\Delta} \delta_{i+\Delta, j} - \sum_{\Delta} U(i, i+\Delta) 2 \delta_{i+\Delta, j}] S_i^+ S_j^+ |0\rangle \quad (9.21)$$

(21) を(20)に代入する. $E/J = \omega$ とおくと

$$\begin{aligned} & \sum_{ij} \{ U(i, j) (2x - \omega) - \sum_{\Delta} U(i, j - \Delta) - \sum_{\Delta} U(i - \Delta, j) \\ & + U(i, i) 2 \sum_{\Delta} \delta_{i+\Delta, j} - \sum_{\Delta} U(i, i+\Delta) 2 \delta_{i+\Delta, j} \} S_i^+ S_j^+ |0\rangle = 0 \quad (9.22) \end{aligned}$$

即ち $i \neq j$ ならば $S_i^+ S_j^+ |0\rangle$ の係数間の関係として

$$\begin{aligned} \cup(i, j)(\omega - 2\pi) + \sum_{\Delta}^6 [\cup(i, j - \Delta) + \cup(i - \Delta, j)] \\ = \cup(i, i) 2 \sum_{\Delta}^6 \delta_{i+\Delta, j} - \sum_{\Delta}^6 \cup(i, i+\Delta) 2 \delta_{i+\Delta, j} \end{aligned} \quad (9.23)$$

が得られる。

i と j が定められているときは $\sum_{\Delta}^6 \delta_{i+\Delta, j} \cdots$ の $\sum_{\Delta}$ は取り去ってよいから

$$\begin{aligned} (\omega - 2\pi) \cup(i, j) + \sum_{\Delta}^6 [\cup(i, j + \Delta) + \cup(i + \Delta, j)] \\ = \delta_{i+\Delta, j} [\cup(i, i) + \cup(j, j) - 2 \cup(i, j)]. \end{aligned} \quad (9.24)$$

(24) において $\delta_{i+\Delta, j}$ は i と j がとなり隣の格子点のときのみ 1 で他は 0 であることを示す。(22) で $\sum$ 内 $i = j$ の項は $S_i^+ S_i^+ |0\rangle = 0$ であるから $\{ \}$ 内は不定である。即ち (24) の左辺第 1 項が $\cup(i, i)$ のときには (24) は成立つ必要はない。しかし、このときも (24) により $\cup(i, i)$ が定まると考えても物理的に意味のある $\cup(i, j)$ に対しては何の影響もないから我々はすべての (i, j) の組に対して (24) の解 $\cup(i, j)$ を求めよう。

重心座標と相対座標

$$2R = i + j \quad r = i - j \quad (9.25)$$

を用い変換

$$U(r, j) = \frac{1}{N} \sum_K e^{iK \cdot R} u_K(r) \quad (9.26)$$

式 (24) にいれると

$$\begin{aligned} (\omega - 2\pi) u_K(r) + 2 \sum_{\Delta}^3 \cos \frac{K\Delta}{2} [u_K(r-\Delta) + u_K(r+\Delta)] \\ = 2 \sum_{\Delta}^6 \delta_{r,\Delta} \left[\cos \frac{Kr}{2} u_K(0) - u_K(r) \right] \end{aligned} \quad (9.27)$$

ここで $\delta_{r,\Delta}$ は Kronecker の δ で r と Δ の nearest neighbor vector の 1 つ のとき 1, それ以外は 0 である。

次に

$$u_K(r) = \frac{1}{N} \sum_k e^{iKr} F_K(k) \quad (9.28)$$

式 (27) にいれると $\frac{1}{N} \sum e^{iKr} \dots$ の係数間の関係として

$$[\omega - \epsilon_K(k)] F_K(k) = \frac{1}{N} \sum_{k'} V(k, k') F_K(k') \quad (9.29)$$

$$\epsilon_K(k) = 4 \sum_{\Delta}^3 \left[1 - \cos \frac{K\Delta}{2} \cos k\Delta \right] \quad (9.30)$$

$$V(k, k') = 4 \sum_{\Delta}^3 \cos k\Delta \left[\cos \frac{K\Delta}{2} - \cos k'\Delta \right] \quad (9.31)$$

(29) は $F_K(k)$ に対する積分方程式 (和分方程式) である。

$\epsilon_K(k)$ は相対運動量 k , 全運動量 K の free spin wave の energy である。 $\sum_{\Delta}^3$ は (100)(010)(001) についての和である。この積分方程式は 3 つの分離核の和を核とする積分方程式であるから 3 元一次方程式の解法に帰せられる。

$$U_K^\Delta = \frac{1}{N} \sum_k (\cos \frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta) F_K(k) \quad (9.32)$$

とおく. (29) の両辺に $\cos \frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta$ をかけ $(\omega - \epsilon_K(k))$ で割ると

$$(\cos \frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta) F_K(k) = \frac{4 \sum_{\Delta'} \cos k\Delta' (\cos \frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta) U_K^{\Delta'}}{\omega - \epsilon_K(k)} \quad (9.33)$$

両辺を $\frac{1}{N} \sum_k$ で総和して

$$U_K^\Delta = \sum_{\Delta'} B_K(\Delta, \Delta') U_K^{\Delta'} \quad (9.34)$$

そこで

$$B(\Delta, \Delta') = 4 \frac{1}{N} \sum_k \frac{\cos k\Delta' (\cos \frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta)}{\omega - \epsilon_K(k)} \quad (9.35)$$

同次一次方程式 (34) が解をもつ為には

$$\det [\delta_{\Delta\Delta'} - B_K(\Delta, \Delta')] = 0 \quad (9.36)$$

でなければならない. (36) をみたす $\epsilon_K(k)$ の値が two spin problem の固有値である.

N 有限のとき (36) の零点は, energy level を与えるが $N \rightarrow \infty$ で連続スペクトル及び離散スペクトルになる. $N \rightarrow \infty$ のときの孤立した零点が bound state energy となる. この様子をしらべてみよう. 以下 Δ, Δ' を i, j と記すこととし, また

1, 2, 3次元について用いられるよう d を次元数 $\int_0^\pi (dk)$ は d 次元の第1 Brillouin 帯についての積分

$$t = -\frac{\omega}{4} + \frac{z}{2}$$

$$\alpha_l = \cos \frac{1}{2} K_l \quad l = x, y, z$$

(9.37)

とすると

$$B(i, j) = D_{ij}(t) - D_j(t) \alpha_i \quad (9.38)$$

$$D_0(t) = \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi \frac{(dk)}{t - \sum_l \alpha_l \cos k_l} \quad (9.39)$$

$$D_i(t) = \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi \frac{\cos k_i}{t - \sum_l \alpha_l \cos k_l} (dk) \quad (9.40)$$

$$D_{ij}(t) = \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi \frac{\cos k_i \cos k_j}{t - \sum_l \alpha_l \cos k_l} (dk) \quad (9.41)$$

(39) - (41) は二体の Green 関数であるが α_l を force constant と見做せば orthorhombic lattice の一体の格子 Green 関数である。

(36) (及び v に相当する 2次元の場合の式) はすべての α_i が等しい場合には因数分解できる。また α_i の1つが0である場合にも類似の因数分解ができる。積分(39) ~ (41) の性質を用いて吟味すると $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha$ の場合及び $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha, \alpha_3 = 0$ の場合の bound state が Wontis³⁶ により

求められている。これより d -立方体は bound state のない領域、1つある領域、2つある領域、3つある領域の4つの領域に分れていることが想像される。 $K=0$ 即ち $d_L=1$ の近くには bound state はない。1次元の場合には任意の K に対して1つの bound state が存在することが証明される。

§10. 強磁性体中における不純物

強磁性体に対してある格子点のスピンが不純物におき変った問題も同様に扱うことが出来る。Spin 波近似で⁴¹ ($T=0$ で正確) 2-magnon interaction を省略して考えれば §6 における格子振動の問題と全く同等で mass の差が spin の大きさの差に、force constant の差が exchange energy の差に対応する。有限温度に対する拡張を Tjablikov 近似で考えれば⁴² spin 波近似の場合の

$$E_k = g\mu H + 2SJz(1 - \gamma_k) \quad (10.1)$$

を

$$E_k = g\mu H + 2\langle S^z \rangle Jz(1 - \gamma_k) \quad (10.2)$$

でおきかえ

$$G_n(E) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{ikn}}{E - E_k} \quad (10.3)$$

を

$$G_n(E) = 2\langle S^z \rangle \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{ikn}}{E - E_k} \quad (10.4)$$

でおきかえればよい。詳細は Refs. 41-43 を参照されたい。

§ 11. 金属中における impurity ^{44, 24,}

結晶の周期ポテンシャル H_0 の中にある電子が不純物による摂動 H_1 を受ける問題を考える. 無摂動系 H_0 の固有関数を $u_{n,k}(\underline{r})$ とする. n はこの Bloch 関数が属する band を示し, $\underline{k}$ は

$$u_{n,\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}_\ell) = e^{i\underline{k} \cdot \underline{R}_\ell} u_{n,\underline{k}}(\underline{r}) \quad (11.1)$$

となるような propagation vector $\underline{k}$ である. この Bloch 関数の energy を $E_n(\underline{k})$ とする

$$H_0 u_{n,\underline{k}}(\underline{r}) = E_n(\underline{k}) u_{n,\underline{k}}(\underline{r}) \quad (11.2)$$

この Bloch 関数から与えられた band の Wannier 関数 $a_n(\underline{r} - \underline{R}_\ell)$ を作る.

$$a_n(\underline{r} - \underline{R}_\ell) \equiv N^{-1/2} \sum_{\underline{k}} u_{n,\underline{k}}(\underline{r}) e^{-i\underline{k} \cdot \underline{R}_\ell} \quad (11.3)$$

(N は周期境界条件が課せられている結晶中の primitive translation の数). 異った site における Wannier 関数は直交する.

$$\begin{aligned} & \int a_n^*(\underline{r} - \underline{R}_\ell) a_{n'}(\underline{r} - \underline{R}_{\ell'}) d\underline{r} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{R}_\ell - \underline{k}' \cdot \underline{R}_{\ell'})} \int u_{n,\underline{k}}^*(\underline{r}) u_{n',\underline{k}'}(\underline{r}) d\underline{r} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\ell - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{\ell'})} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{nn'} \\
 &= \delta_{\ell\ell'} \delta_{nn'}
 \end{aligned} \tag{11.4}$$

Wannier 関数に H_0 を operate すると

$$\begin{aligned}
 H_0 a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\ell) &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\ell} H_0 u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
 &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\ell} E_n(\mathbf{k}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\ell} E_n(\mathbf{k}) \sum_{\ell'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\ell'}} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\ell'})
 \end{aligned} \tag{11.5}$$

であるから

$$\int a_n^*(\mathbf{r}) H_0 a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} = E_n(\mathbf{R}_i) \tag{11.6}$$

により $E_n(\mathbf{R}_i)$ を定義する。

$$\begin{aligned}
 (6) \text{ の左辺} &= \frac{1}{N} \sum \sum \int u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) H_0 u_{n,\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} d\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{N} \sum \sum e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} E_n(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}
 \end{aligned}$$

であるから

$$E_n(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \tag{11.7}$$

$$E_n(\mathbf{k}) = \sum_j E_n(\mathbf{R}_j) e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \tag{11.8}$$

である。(7) を (5) に代入すると

$$\begin{aligned}
 H_0 a_n(r - R_\ell) &= \sum_{j \neq \ell} \delta_{R_\ell - R_\ell + R_j} E_n(R_j) a_n(r - R_\ell) \\
 &= \sum_{\ell} E_n(R_\ell - R_{\ell'}) a_n(r - R_{\ell'}) \quad (11.9)
 \end{aligned}$$

となる。 $H = H_0 + H_1$ の固有関数を $\psi(r)$ とし、これを Wannier 関数で展開した展開係数を $U_n(R_j)$ とする。

$$\psi(r) = \sum_n \sum_j U_n(R_j) a(r - R_j) \quad (11.10)$$

$$(H_0 + H_1) \psi = E \psi \quad (11.11)$$

(11) の両辺に $\int dr a_m^*(r - R_i)$ を作用させると

$$\begin{aligned}
 \sum_n \sum_j U_n(R_i) E_n(R_j - R_i) \delta_{nm} + \sum_n \sum_j U_n(R_i) V_{nm}(R_i, R_j) \\
 = \sum_n \sum_j E U_n(R_i) \delta_{nm} \quad (11.12)
 \end{aligned}$$

故に

$$\sum_j E_m(R_j - R_i) U_m(R_j) + \sum_n \sum_j V_{nm}(R_i, R_j) U_n(R_j) = E U_m(R_i) \quad (11.13)$$

(13) は $U_m(R_i)$ に対する定差方程式である。 $V_{nm}(R_i, R_j) = 0$ なら (13) は $U_m(R_j) = e^{i k \cdot R_j}$ なる解を有する。

いま band は一つであり Wannier function が nearest neighbor までとしか相互作用せず impurity potential はその site にしか作用しないとする

$$E(0) = \int a^*(\underline{r} - \underline{R}_i) H_0 a(\underline{r} - \underline{R}_i) d\underline{r} \quad (11.14)$$

$$E(1) = \int a^*(\underline{r} - \underline{R}_i) H_0 a(\underline{r} - \underline{R}_{i+\Delta}) d\underline{r} \quad (11.15)$$

$$V(0) = \int a^*(\underline{r} - \underline{R}_i) V(\underline{r}) a(\underline{r} - \underline{R}_i) d\underline{r} \quad (11.16)$$

$$E(R_i) = 0 \quad R_i \neq 0, \Delta, \quad (11.17)$$

$$V(R_i) = 0 \quad R_i \neq 0 \quad (11.18)$$

となり (13) は

$$(E(0) - E) U(R_i) + E(1) \sum_{\Delta} U(R_i + \Delta) = 0 \quad (11.19)$$

$$R_i \neq (0, 0, 0)$$

$$(E(1) + V(0) - E) U(0) + E(1) \sum_{\Delta} U(\Delta) = 0 \quad (11.20)$$

$$E = E(0) + 2E(1) [\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z] \quad (11.21)$$

となる。即ち $U(R)$ は §2 での体格子 Green 関数である。Koster-Slater⁴⁴ は (19) - (21) にもとづいて金属に対する impurity level の出現条件を論じた。

§12. 従来の計算法

以上格子 Green 関数のあらわれる問題の一部について概観を与えた。その他にも格子 Green 関数のあらわれる問題は数多くあるがその計算法は従来簡単ではなかった。そこで我々の研究を始める以前の計算法の主なものにふれておこう。

その一つは Slater Koster⁴⁴ の無限積分

$$I_{sc}(a > 3; l, m, n) = \int_0^\infty dt e^{-at} I_l(t) I_m(t) I_n(t) \quad (12.1)$$

$$I_{sc}(a < 3; l, m, n) = i^{l+m+n+1} \int_0^\infty dt e^{-iat} J_l(t) J_m(t) J_n(t) \quad (12.2)$$

で彼等は Simpson の方法によりこの数値積分を行なった。

また Tickson⁴⁵ は

$$I(b > 1) = \frac{1}{\pi^3} \iiint \frac{dx dy dz}{3b - (\cos x + \cos y + \cos z)}$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \frac{2}{3b - \cos x} K\left(\frac{2}{3b - \cos x}\right) dx \quad (12.3)$$

により I_s を楕円積分の積分であらわした。ここで $K(u)$ は第一種楕円積分

$$K(u) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - u^2 \sin^2 \theta}} \quad (12.4)$$

である。

Mannari Kawabata¹⁸ は楕円積分が算術幾何平均法*で収束よい計算が出来ることを利用し (3) 及び w_{fcc} に対する同様の式にもとづいて $I_{sc}(a>3)$, $I_{fcc}(a>3)$, $I_{bcc}(a>1)$ の数表を作成した。 $I_{bcc}(a>1)$ は楕円積分自体であらわされている。
 以上の他計算法と数表に関する review は ref. 1 にあげてある。

*

$a > 0$, $b > 0$ のとき

$$a_0 = a \quad , \quad b_0 = b \quad (12.5)$$

$$a_n = \frac{a_{n-1} + b_{n-1}}{2} \quad (12.6)$$

$$b_n = \sqrt{a_{n-1} b_{n-1}} \quad (12.7)$$

とすると

$$\lim a_n = \lim b_n = M(a, b) \quad (12.8)$$

を a, b の算術幾何平均という。これに対し

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{a} \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \quad (12.9)$$

$$k^2 = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}} \quad (12.10)$$

が証明されている。(kは複素数値でもいい Gauss 1801)

§. おわりに

以上 random walk, 格子振動, 磁性体の Heisenberg 模型, 金属電子論等においていかにして格子 Green 関数がいかに求まるか, 特に不純物準位の問題といかに結びつくかを概観した。その結果については詳しくは原著等を見られたい。また我々の研究は本研究会の講演の他 refs. 1 - 14 をごらん頂きたい。(研究会の際は解折接続による考え方の例として bcc についてのベタがこれは ref. 4 に発表してあるので省略する。)

- 1) S. Katsura, T. Morita, S. Inawashiro, T. Horiguchi and Y. Abe: Lattice Green's function. Introduction, J. Math. Phys. 12 (1971) 892.
- 2) S. Katsura, S. Inawashiro and Y. Abe: Lattice Green's function for the simple cubic lattice in terms of Mellin-Barnes Type integral, J. Math. Phys. 12 (1971) 895.
- 3) T. Morita and T. Horiguchi: Lattice Green's functions for cubic lattices in terms of the complete elliptic integral, J. Math. Phys. to be published.
- 4) S. Katsura and T. Horiguchi: Lattice Green's function for the body-centered cubic lattice, J. Math. Phys. 12 (1971) 230.
- 5) T. Horiguchi and T. Morita: Divergence of the level density of the cubic lattices, Phys. Lett. 32A (1970) 191.
- 6) T. Morita and T. Horiguchi: Calculation of the lattice Green's function for the B.C.C., F.C.C., and rectangular lattices, J. Math. Phys. to be published.
- 7) S. Katsura and S. Inawashiro: Lattice Green's function for the rectangular and the square lattices at arbitrary points, J. Math. Phys. to be published.
- 8) T. Morita and T. Horiguchi: Formulas for the lattice Green's function for the cubic lattices in terms of the complete elliptic integral, J. Phys. Soc. Japan 30 (1971) 957.

- 9) T. Morita: Useful procedure for computing the lattice Green's function -- Square, tetragonal and B.C.C. lattices, J. Math. Phys. submitted.
- 10) T. Horiguchi: Lattice Green's function for the simple cubic lattice, J. Phys. Soc. Japan 30 (1971) 1261.
- 11) T. Horiguchi, Y. Yamazaki and T. Morita: Lattice Green's function for the orthorhombic lattice in terms of complete elliptic integral, J. Math. Phys. submitted.
- 12) T. Morita and H. Horiguchi: Table of lattice Green's functions for the cubic lattices, Faculty of Engineering, Tohoku Univ. (1971)
- 13) T. Morita and T. Horiguchi: Analytic properties of the lattice Green's function, J. Phys. A. submitted.
- 14) Y. Abe and S. Katsura: Lattice Green's function for the tetragonal lattice, J. Phys. Soc. Japan submitted.
- 15) E. W. Montroll: in Proceedings of the Third Berkeley Symposium on Mathematics Statistics and Probability, Vol. 3, ed by J. Neyman (Berkeley and Los Angeles, Univ. of Calif. Press, 1956) p. 209.
- 16) A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss, R. Herman and H. W. Milnes: Memoires Acad. Royale de Belgique (Science) 14 (1960).
- 17) G. N. Watson: Quart. J. Math. (Oxford) 10 (1939) 266.

- 18) I. Mannari and C. Kawabata: Research Notes, Dept.
Phys. Okayama Univ. No. 15 (1964).
- 19) E. W. Montroll: J. Soc. Indust. Appl. Math. 4
(1956) 241.
- 20) A. A. Maradudin, E. W. Montroll and G. H. Weiss:
Theory of lattice dynamics in the harmonic approxi-
mation, Solid State Phys. Suppl. 3. Ed. by F. Seitz
and D. Turnbull, (1963).
- 21) S. Takeno, S. Kashiwamura and E. Teramoto: Prog.
Theor. Phys. Suppl. No. 23 (1963) 124.
- 22) S. Takeno: in Lattice Dynamics, ed by R. F. Wallis,
(Pergamon, 1964) 497.
- 23) Y. Mitani and S. Takeno: Prog. Theor. Phys. 33
(1965) 779.
- 24) Yu. A. Izyumov: Advances in Phys. 14 (1965) 569.
- 25) S. V. Tjablikov: Ukr. Mat. Zh. 11 (1959) 287.
- 26) Fu-Cho Pu: Doklady Nauk SSSR 130 (1960) 1244;
131 (1960) 546 [Soviet Phys. Doklady 5 (1960) 128;
5 (1960) 321].
- 27) A. C. Hewson and D. ter Haar: Physica 30 (1964).
- 28) M. E. Lines: Phys. Rev. 135 (1964) 1336.
- 29) S. Katsura and F. Matsubara: Phys. Letters, in press.
- 30) T. Asano: preprint.
- 31) V. Mubayi and R. V. Lange: Phys. Rev. 178 (1969)
882.
- 32) A. Oguchi: Prog. Theor. Phys. 44 (1970) 1548.
- 33) T. Shimizu: J. Phys. Soc. Japan 30 (1971) 1292.

- 34) A. Oguchi: preprint.
- 35) F. J. Dyson: Phys. Rev. 102 (1956) 1217.
- 36) T. Morita: Prog. Theor. Phys. 20 (1958) 728.
- 37) J. G. Hanus: Phys. Rev. Lett. 11 (1963) 336.
- 38) M. Wortis: Phys. Rev. 132 (1963) 88.
- 39) N. Fukuda and M. Wortis: J. Phys. Chem. Solids 24 (1963) 1675.
- 40) R. G. Boyd and J. Callaway: Phys. Rev. 138 (1965) A 1621.
- 41) T. Wolfram and J. Callaway: Phys. Rev. 130 (1963) 2207.
- 42) S. Takeno: Prog. Theor. Phys. 30 (1963) 731.
- 43) D. Hone, H. Callen and L. R. Walker: Phys. Rev. 144 (1966) 283.
- 44) G. F. Koster and J. C. Slater: Phys. Rev. 95 (1954) 1167; 96 (1954) 1208.
- 45) M. Tickson: J. Res. Natl. Bur. Stds. 50 (1953) 177.
- 46) T. Kotera: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 23 (1963) 141.
- 47) I. M. Lifshitz: Advanc. Phys. 13 (1964) 485.
- 48) A. A. Maradudin: Solid State Physics 18 (1966) 273.