

ランダムな不純物に対する近似法 I

— “排除効果”を考慮した self-contained な第 1 近似—

米 沢 富 美 子 (京大基研)

§ 1 序

結晶の中に不規則に分布した不純物による諸々の物性への影響を調べる問題は、古くからいろいろの分野でとり上げられて来たが、決定的な方法が確立されないままに今日に至っている。なかでも、不規則格子の格子振動のスペクトルとか、不純物結晶中の電子構造を求める問題は、多くの著者の関心の的になって来たが、これまでに出了れた方法の多くは、1次元の限られたモデルに特有のもので、¹⁾ 3次元のより現実的な問題への拡張は困難であった。これに反して、次元とモデルの制限をあまり受けずに、公式化のできる方法として、グリーン関数の方法が²⁾ 最近発展して来た。この方法は、上記の利点以外に、対象になる系の静的性質のみならず、動的な性質に対する情報をも提供するという点に於て、他の方法を凌いでいる。しかし、例えば、フォノンの振動スペクトルをみた場合、Dean³⁾ や Payton and Visscher⁴⁾ 等の計算機実験の結果にあらわれる微細構造を説明するのに、これまでのグリーン関数の方法では、ある限られた濃度領域以外では、無力であった。又、グリーン関数法による結果が、Host-defect に関する dual 対称性をみたす⁵⁾ ためには、“排除体積”効果を取り入れる必要のあることを先に示したが (Yonezawa - Matsubara, 以後 YM II として引用する), そのために自己エネルギーに物理的でない極が導入されたり、収束が悪くなったりした。

この論文の目的は、上記のようなグリーン関数法の欠陥がどこに由来するかを述べ、その解決法を示すことにある。微細構造を説明できないのは、近似としてひろい出すべき“より重要な項”に対する判定条件があいまいであったため、「濃度」と「近似の良さ」との関係が、はっきり与えられていなかったことによっている。一方排除効果の不注意なとり入れ方が、近似の各段階に於る self-containedness を破り、第 2 の欠点の原因になってい

米沢富美子

る。これら2つの問題点は互いに密接に関連しており、一般にグリーン関数の方法とか、多重散乱の方法とかが、妥当な結果を与えない場合には、上記2つの原因が何らかの形でからんで来ているようである。

この論文では、状態密度を求めるための formulation を通して、これらの問題点、— 特に後者に主眼をおいてとり上げて行く。前者の問題が解決された上で考慮されるべきもので、これについては洞察のみを与え、詳論は次の機会にまわすことにする。説明の簡単のため、例題として内部自由度をもたない非周期的なポテンシャル場を運動する電子の状態密度を考え、一電子近似でとり扱う。しかし、ここで議論される方法は一般的なものであり、上の例題より制限の弱い場合にも適用可能である。

§ 2 “排除効果”

結晶内に置換型不純物が全くランダムに分布しているとすると、不純物の種々の配置に対するアンサンブル平均は、 $F(R_{l_1}, R_{l_2}, \dots, R_{l_j})$ を、 j 個の不純物原子の位置 $R_{l_1}, R_{l_2}, \dots, R_{l_j}$ についての任意の関数とする時、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \langle F(R_{l_1}, R_{l_2}, \dots, R_{l_j}) \rangle_{\{l_1, \dots, l_j\}}^{\Sigma'} &= c^j \sum_{n_1, \dots, n_j}^{\Sigma'} F(R_{n_1}, R_{n_2}, \dots, R_{n_j}) \quad (2.1) \end{aligned}$$

ここで $\sum_{\{l_1, \dots, l_j\}}^{\Sigma'}$ は不純物の位置についての和、 $\sum_{n_1, \dots, n_j}^{\Sigma'}$ は全ての格子点についての和を表わし、和の記号に prime をつけたのは、そこにあらわれる変数 $R_{l_1}, \dots, R_{l_j}$ (又は $R_{n_1}, \dots, R_{n_j}$) が、全て互いに等しくないことを意味する。この平均操作に於る和の制限が、ここで問題にしている“排除効果”に関連して来るのである。

“排除体積効果”を説明するために、多重散乱の formulation を借りて一電子グリーン関数を散乱行列 T_α であらわすと、

$$G = G_0 + \sum_{\alpha} G_0 T_{\alpha} G_0 + \sum_{\alpha \neq \beta} G_0 T_{\alpha} G_0 T_{\beta} G_0 + \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} G_0 T_{\alpha} G_0 T_{\beta} G_0 T_{\gamma} G_0 + \dots \quad (2.2)$$

と書ける。(2.2) 式の和の変数 α, β, r に対する制限は、「相続く 2 つの変数が互いに等しくない」という条件だけで、例えば第 4 項では $\alpha \neq r$ は要求されていない。一方、(2.2) 式から状態密度を計算するためには、(2.2) 式をまず配置平均し、ついで平均されたグリーン関数 $\langle G \rangle$ が Dyson 方程式

$$\langle G \rangle = G_0 + G_0 \Sigma \langle G \rangle \quad (2.3)$$

と書けるようなプロパーな自己エネルギー Σ を決めることに帰結される。ところが、最初の段階の平均操作では、(2.1) 式で示されているように和の変数が全て異なるように (2.2) 式を少し並べ変えておかねばならない。次に Dyson 方程式を解くためには、(2.1) 式の右辺で示唆されるような和の制限をとり除く方法が控じられねばならない。この第 2 段階が難解で Σ がすぐには求まらないのであるが、YM II ではその一般的なとり扱い方法が与えられた。以下この節では、“排除効果”という観点から、YM II をもう一度見直してみることしよう。

§ 3 “排除効果”をとり入れる一般的方法

[3.1. Formulation — 2 次の場合の説明]

不純物を含む系の平均された一電子グリーン関数は

$$\begin{aligned} \langle G_{kk'} \rangle &= G_0(k) \delta_{kk'} + G_0(k) M_1(k-k') V_{kk'} G_0(k') \\ &\quad + G_0(k) \sum_{k_1} M_2(k-k_1; k_1-k') V_{kk_1} V_{k_1 k'} G_0(k_1) G_0(k') + \dots \end{aligned} \quad (3.1)$$

と書ける。但し

$$M_s(p_1, p_2, \dots, p_s) = \left\langle \prod_{j=1}^s \sum_{\{\ell_j\}} \exp(-i p_j \cdot R_{\ell_j}) \right\rangle, \quad (3.2)$$

$$\rho(p) = \sum_{\{\ell\}} e^{-i p \cdot R_{\ell}} \quad (3.3)$$

以下、 s の小さい値に対する $M_s(p_1, \dots, p_s)$ を求める過程を追いつら、和の制限をとり除く一般的方法を示してみよう。一次のモーメントは、(2.1) 式を使って

米沢 富美子

$$\begin{aligned}
 M_1(p) &= \langle \sum_{\{\ell\}} \exp(-ip \cdot R_\ell) \rangle = c \sum_n \exp(-ip \cdot R_n) \\
 &= N_c \delta(p) \equiv C_1(p)
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

$C_1(p)$ を一次の Cumulant と呼ぶ。次に 2 次のモーメントを考えると、(3.2) 式の定義から明らかなように、 R_{ℓ_1} と R_{ℓ_2} に対する和があらわれるが、(1) $\ell_1 = \ell_2$ の場合と、(2) $\ell_1 \neq \ell_2$ の場合とを区別して考えなければならない。この分離 (partitioning) の操作を式で書くと

$$\begin{aligned}
 M_2(p_1, p_2) &= \langle \sum_{\{\ell\}} \exp[-i(p_1 + p_2) \cdot R_\ell] \rangle \\
 &+ \langle \sum_{\{\ell_1\} \neq \{\ell_2\}} \sum \exp[-ip_1 \cdot R_{\ell_1} - ip_2 \cdot R_{\ell_2}] \rangle \\
 &= c \sum_n \exp[-i(p_1 + p_2) \cdot R_n] \\
 &+ c^2 \sum_{n_1 \neq n_2} \sum \exp[-i(p_1 \cdot R_{n_1} + p_2 \cdot R_{n_2})] \tag{3.5}
 \end{aligned}$$

ここで、(2.1) 式を使って配置平均を行った。第 2 項の和の変数 n_1 と n_2 が互いに等しくないという制限をとり除き、 n_1 と n_2 とに対する和をそれぞれ独立に行なえるようにするたみに、 $c^2 \sum_n \exp[-i(p_1 + p_2) \cdot R_n]$ という項を第 2 項にくり入れ、その代りに同じ量を右辺全体から引いておくと、

$$\begin{aligned}
 M_2(p_1, p_2) &= N_c \delta(p_1 + p_2) \\
 &+ c^2 \left\{ \sum_{n_1} \sum_{n_2} \exp(-ip_1 \cdot R_{n_1}) \exp(-ip_2 \cdot R_{n_2}) \right. \\
 &\quad \left. - \sum_n \exp[-i(p_1 + p_2) \cdot R_n] \right\} \\
 &= N_c \delta(p_1 + p_2) + c^2 \{ N \delta(p_1) \times N \delta(p_2) - N \delta(p_1 + p_2) \} \tag{3.6}
 \end{aligned}$$

次に、この式の右辺を N のべき乗について等しい項をまとめて並べ変えると、

$$M_2(p_1, p_2) = N(c - c^2) \delta(p_1 + p_2) + Nc \delta(p_1) \times Nc \delta(p_2) \\ \equiv C_2(p_1, p_2) + C_1(p_1) C_2(p_1) \quad (3.7)$$

$C_2(p_1, p_2)$ を 2 次の cumulant と呼ぶ。

[3.2 一般的手続き]

一般に高次のモーメント $M_s(p_1, p_2, \dots, p_s)$ を求める際にも, $M_2(p_1, p_2)$ の場合に上に示したのと同じ過程をふまねばならない。すなわち

- (1) 分離と平均の操作 (Partitioning and Averaging) ;

$M_s(p_1, p_2, \dots, p_s)$ を和の変数 $R_{\ell_1}, R_{\ell_2}, \dots, R_{\ell_s}$ の重なり具合に応じて項を分離し, その各々の項について (2.1) 式で与えられる平均操作を行う。

- (2) 和の制限をとり除く操作 (Removement of the restriction over the summation indices.)

適当な項を加減して, 和に対する制限をとり除く,

- (3) 項の並べ変え (Rearrangement of the obtained terms.)

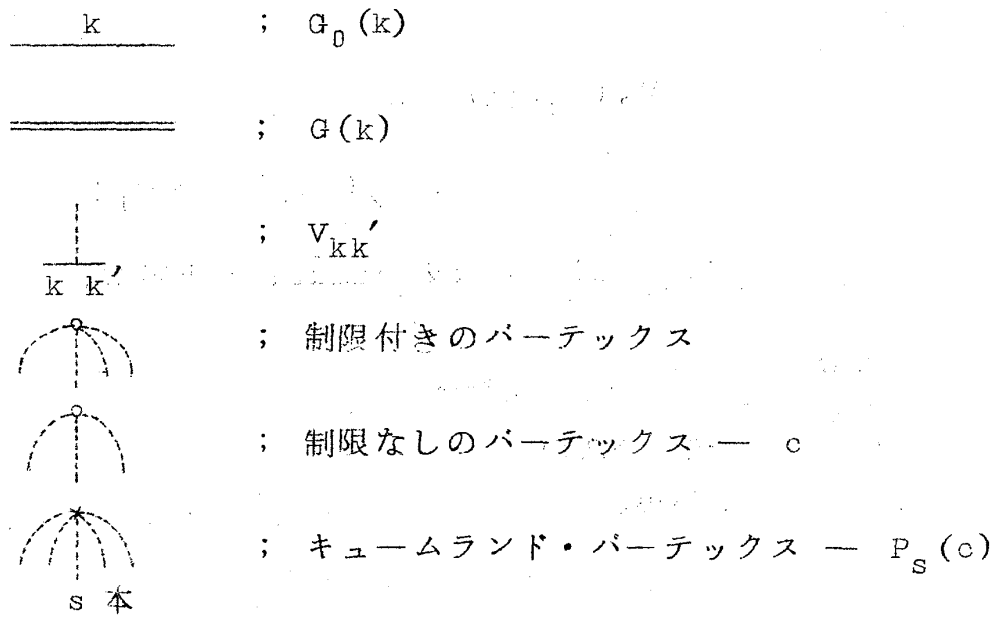
得られた項を並べ変えて, N のべき乗の等しいものをまとめる。

[3.3 Diagram による解釈]

上記の 3 つの手続きは, グラフの助けを借りると理解がたやすくなる。そのためにまずグラフと式の対応関係を図 1 によって定義する。

後の説明の便宜のために, 次の 3 種類のグラフを考えることにする。

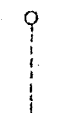
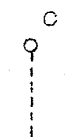
- (i) 制限付きのグラフ; 白いマルで表わされるバーテックスを含むグラフを制限付きのグラフと呼ぶ。この種のグラフにあらわれる和の変数は, グラフのもつトポロジカルな制限と同じ制限をもつ。
- (ii) 制限なしのグラフ; 黒いマルであらわされるバーテックスを含むグラフをこう呼ぶ。この種のグラフでは, 和の変数に対する制限がとり除かれており, 黒いマル 1 ケに $\circ$ がひとつ割当てられる。
- (iii) キュームランド・グラフ; $\times$ 印であらわされるバーテックスをもつグラフをキュームランド・グラフ (又はくり込まれたグラフ) と呼び,



プロパーなグラフ 1 個につき N をひとつ割当てる。

図 1. グラフと式の関係

$$M_1(p) = \text{diagram 1} = \text{diagram 2} = \text{diagram 3} \quad (a)$$

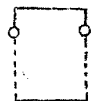
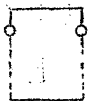




$$M_2(p_1, p_2) = \text{diagram 4} + \text{diagram 5} \quad (b)$$



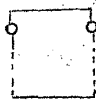

$$= \text{diagram 6} + \{ \text{diagram 7} + \text{diagram 8} - \text{diagram 9} \} \quad (c)$$



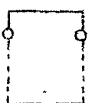



$$= \text{diagram 10} + \{ \text{diagram 11} - \text{diagram 12} \} \quad (d)$$





$$= \{ \text{diagram 13} - \text{diagram 14} \} + \text{diagram 15} \quad (e)$$


$$= \text{diagram 16} + \text{diagram 17} \quad (f)$$




図 2. $M_1(p)$, $M_2(p_1, p_2)$ を求める過程のグラフによる解釈

バーテックスから s 本の相互作用線が出ている時, s 次のキュームラントを割当ててゐる。

図 2 (a) は 1 次のモーメントを求める過程をグラフで表わしたものである。1 次の場合に限る, 1 の 3 種類のグラフを区別する必要がない。一方図 2 (b) ~ (f) には, 2 次のモーメントを求める過程が示されている。(b) は分離と平均の操作を表わす。(c) は, 制限をとり除く目的である適当な項 (今の場合は $c^2 \sum_n \exp[-i(p_1 + p_2) \cdot R_n]$) を加減する操作をあらわし, (d) はその結果, 和の変数に対する制限がとり除かれたことを意味している。(c) 図のカッコ内の第 2 及び第 3 項, 又は (d) 図のカッコの中の第 2 項は, $c^2 \sum_n \exp[-i(p_1 + p_2) \cdot R_n]$ に相当する項である。このように, いくつかのバーテックスが実線で結ばれている時には, それらのバーテックスは 1 つの共通の格子点を示しており, その全体に対して N がひとつ割当てられる。しかし, c の方は, バーテックスの数だけ割当てられることを意味している。

排除効果を正しく考慮に入れないこれまでの近似では, (d) 図のカッコの中の第 2 項を無視する形にし, 結局バーテックス 1 ケに対し, いつも c が 1 ケ割当てられていたわけである。さて (e) 図は (d) 図の各項を N のべきに応じて並べ変えたことを表わしており, (f) 図は最終的に $M_2(p_1, p_2)$ が $C_1(p)$ と $C_2(p_1, p_2)$ で定義されることを与えている。ここで 2 次のキュームラント $C_2(p_1, p_2)$ が定義された。

同様にして, 3 次のモーメント $M_3(p_1, p_2, p_3)$ を求めるための §(3.2) の 3 つの過程を図 3 (a), (b), (c) に示し, その結果定義される 3 次のキュームラントを (d) 図に与える。全く平行した議論から $C_4(p_1, p_2, p_3, p_4)$ が図 4 のように得られる。

[3.4 キュームラントの求め方 — 一般の次数の場合]

以上の結果から容易に類推できるように, 一般に s 次のキュームラントは,

$$C_s(p_1, p_2, \dots, p_s) = N P_s(c) \delta(p_1 + p_2 + \dots + p_s) \quad (3.8)$$

$P_s(c)$ は次について s 次の多項式で, $s \leq 4$ の場合は図 2, 3, 4 から次の

(a) Partitioning;

$$M_3(p_1, p_2, p_3) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5}$$

(b) Removal of the restriction;

Figure 1 shows a sequence of 10 diagrams illustrating the reduction of a 2D diagram to a 1D diagram. The diagrams are arranged in two columns. The first column contains 5 diagrams, and the second column contains 5 diagrams. The diagrams are connected by equals and minus signs, showing a sequence of transformations. The final result is a 1D diagram with three vertical lines and a star symbol in a circle.

(c) Rearrangement of
diagrams ;

(d) $M_3(p_1, p_2, p_3) =$

$$C_3(p_1, p_2, p_3) \equiv \text{diagram 1} - \text{diagram 2} - \text{diagram 3} - \text{diagram 4} - \text{diagram 5} \\ \equiv \text{diagram 6}$$

図 3. $M_3(p_1, p_2, p_3)$ をグラフにより求める手続き

$C_4(p_1, p_2, p_3, p_4) \equiv$

図4. 4 次のキュームラント

ように計算される。

$$P_1(c) = c \quad (3.9a)$$

$$P_2(c) = c - P_1(c) P_1(c) = c - c^2 \quad (3.9b)$$

$$P_3(c) = c - 3P_1(c) P_2(c) - (P_1(c))^3 = c - 3c^2 + 2c^3 \quad (3.9c)$$

$$\begin{aligned} P_4(c) &= c - 4P_1(c) P_3(c) - 3P_2(c) P_2(c) - 6P_1(c) P_1(c) P_2(c) - (P_1(c))^4 \\ &= c - 7c^2 + 12c^3 - 6c^4 \end{aligned} \quad (3.9d)$$

一般に任意の s に対する $P_s(c)$ は

$P_s(c) = c$ (≡ 1 個の黒マルから s 本の相互作用線の出ているグラフの寄与)

— (実線をつないだ時, 第 1 項のグラフとトポロジカルに等価になる他の全ての高次のグラフからの補正)

$$\begin{aligned} &= c - \sum_{(2)} P_{m_1}(c) P_{s-m_1}(c) - \sum_{(3)} P_{m_1}(c) P_{m_2}(c) P_{s-m_1-m_2}(c) \dots \\ &\quad - \sum_{(s-1)} P_2(c) (P_1(c))^{s-2} (P_1(c))^s \end{aligned} \quad (3.10)$$

ここで $\sum_{(\ell)}$ は, $p_1, p_2, \dots, p_s$ を ℓ ケの組に分ける分け方のあらゆる可能な場合についての和を意味する。

この $P_s(c)$ は一般に母関数を使って次の式で定義されることを YM II で示した。

$$g(x; c) = \log(1 - c + c e^x) = \sum_{s=1}^{\infty} P_s(c) X^s / s! \quad (3.11)$$

[3.5 $\Sigma(1)$ の求め方]

以上の議論をまとめると, (2.4) 式の Dyson 方程式をみたす正しい自己エネルギー Σ は,

(i) 全ての可能なプロパー, キュームランド, グラフを描き,

(ii) その各グラフを，図1で与えられる処方せんで数えあげる。但しパーテックスには $P_s(c)$ を割当てる。

しかし，実際には全ての可能なグラフを加え合わせるのは不可能であるので，何らかの判定条件の下に，より重要な項のみをひろい出す。例えば，1個の不純物からの寄与を完全にとり入れることが大切で，何の全ての不純物からの効果は，ある平均された媒質としてとり扱うことが可能である場合には，図5(a)に描かれているようなグラフのみを加え合わせればよいことになる。これを1次の自己エネルギーと呼び， $\Sigma(1)$ と書くことにすると，Iの処方せんによれば

$$\Sigma(1) = N V \sum_{s=1}^{\infty} P_s(c) (Z V)^{s-1} \quad (3.12)$$

で与えられる。ここで $Z = \sum_k G(k)$ である。

(a) $\Sigma(1)$ or $\Sigma(1,1)$;		+		+		+	
(b) $\Sigma_0(1)$ or $\Sigma'_0(1,1)$;		+		+		+	

図5. 1次の自己エネルギーを与えるグラフ

§ 4 近似を self-contained にする方法

[4.1 $\Sigma(1)$ のもつ困難]

前節では“排除体積”効果を考慮するわずらわしい手続きを，グラフの助けにより簡単化し，排除効果をくり込んだキュームラント $P_s(c)$ を求める方法を示した。この方針にしたがって，最低近似として， $\Sigma(1)$ を求めたが，この自己エネルギーには次に述べるようないくつかの困難があらわれる。

- (i) 物理的でない極があらわれる。
- (ii) (3.12) 式の右辺の級数の収れんが保証されておらず， $\Sigma(1)$ は解析の意味では定義されていない。

まず(i)の性質をみるために、 $\mathcal{Z}(1)$ を c のべきで展開してみよう。 $P_s(c)$ は

$$P_s(c) = \sum_{m=1}^s P_{s,m} c^m = \sum_{m=1}^s \left\{ \sum_{k=1}^m (-1)^{k-1} \binom{m-1}{k-1} k^{s-1} \right\} c^m \quad (4.1)$$

で与えられるから (Appendix A 参照), $\mathcal{Z}(1)$ は

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(1) &= NV \sum_{s=1}^{\infty} P_s(c) (ZV)^{s-1} \\ &= NV \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \sum_{s=m}^{\infty} \sum_{k=1}^m (-1)^{k-1} \binom{m-1}{k-1} (kZV)^{s-1} \right\} c^m \\ &= NV \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \sum_{k=1}^m (-1)^{k-1} \binom{m-1}{k-1} \frac{(kZV)^{m-1}}{1-kZV} \right\} c^m \quad (4.2) \end{aligned}$$

$1 - ZV = 0$ という式は、ただ 1 個の不純物がある時の局在モードを与える式であるから、 c に比例する項のもつ極は、物理的に意味をもっている。一方 $k \neq 1$ なる時、 $1 - kZV = 0$ という式は、今考えている不純物の質量 m の k 倍の質量 km をもつ不純物が 1 ケある時の局在モードを与える式に相当する。これは言い変えると、質量 m の不純物が k ケ同じ格子点上に集まった場合の局在モードを与える式であると考えてもよい。ところが、いまは同一格子点上に 2 ケ以上の不純物原子の来る可能性は除外されているから、

$1 - kZV = 0$ ($k = 2, 3, 4, \dots$) という極は物理的に意味をもたない。

(4.2) 式から明らかなように、一般に c^m に比例する項には、 $(m-1)$ ケの物理的でない極 ($1 - kZV = 0$, $k = 2, 3, 4, \dots, m$) があらわれる。

次に(ii)の性質は、 $P_s(c)$ が s と共に著しく大きい振巾で振動することから予想できる。このことは、 $P_s(c)$ vs c の曲線を $1 \leq s \leq 10$ について描いた第 6 図からも明らかである。

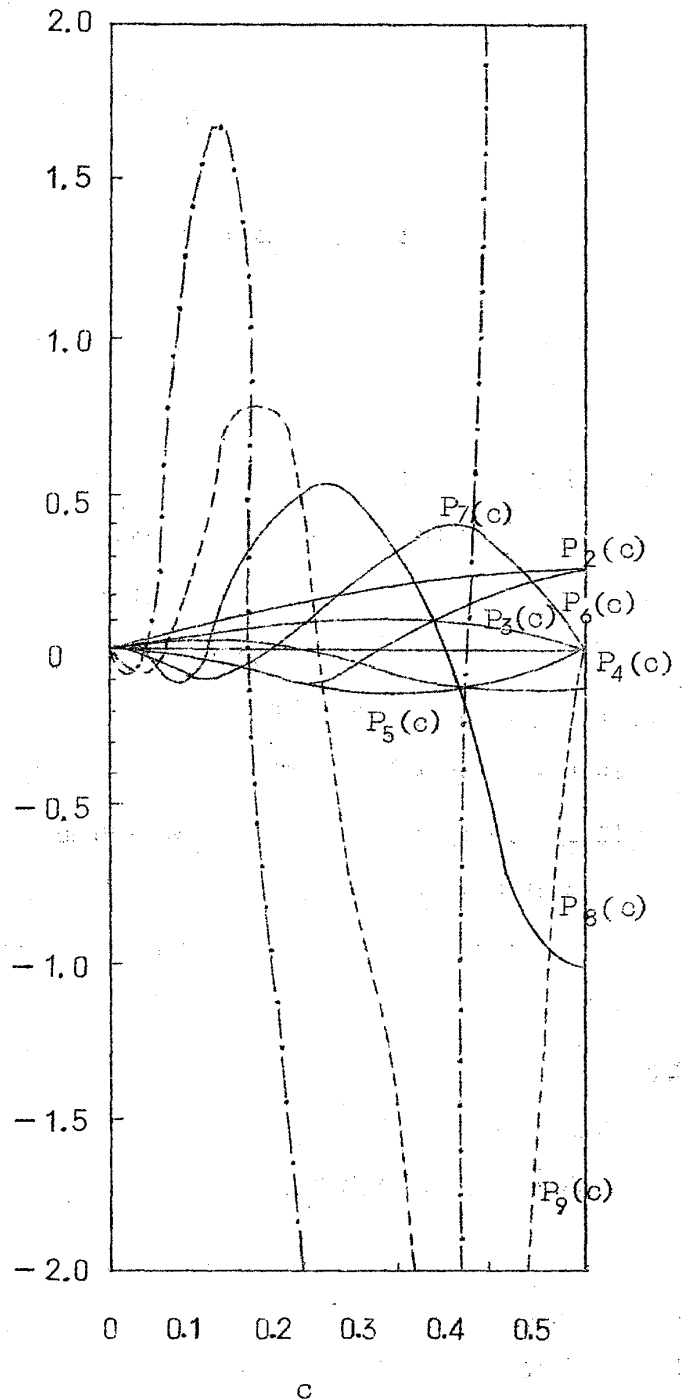
[4.2 self-containedness について]

以上のような一次の自己エネルギー $\mathcal{Z}(1)$ のもつ困難は、近似が self contained でなかったことに原因している。言い変えると、キュームラン

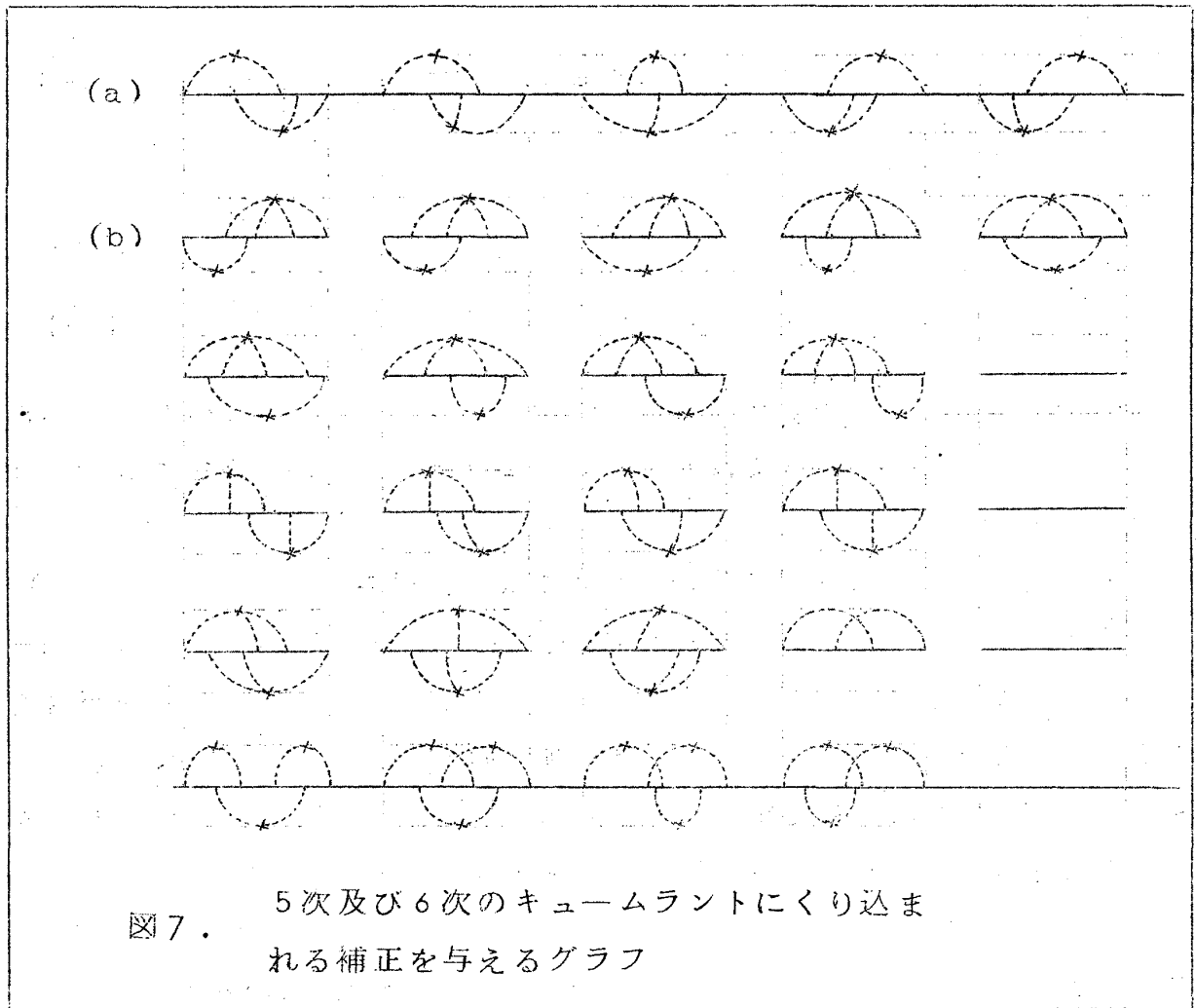
米沢富美子

トにくり込むべき補正と，近似の程度が考慮されていなかったためである。例えば4次のキュームラントについて考えると，前節で求められた $P_4(c)$ の中には，第4図の中で(II)の項からの補正も含まれる。ところが，第5(a)図で選ばれた1次の自己エネルギーでは，この項のような cross したグラフ又は irreducible なグラフからの寄与は全部無視されている。(第4図(i)の様に，clustering の効果を $G_0(k)$ へのくり込みとして処理できるグラフに対して，(II)のようなグラフを irreducible なグラフと呼ぶ。)この様にグラフそれ自身は考慮されていないにもかかわらず，そのグラフからの補正はおどさずに全部とり入れたという点で self-containedness が破れている。

同様のことは，5次以上のキュームラントの場合にもいえる。5次のキュームラントでいえば，第7(a)図に示される5つの項からの補正が，又6次のキュームラントでは第7(b)図で示される20ヶのグラフからの補正が余分に含まれていることになる。



第6図 $P_s(c)$ VS c curves.



[4.3 self-contained に求められた1次の自己エネルギー $\Sigma(1,1)$]

上記のように, $P_s(c)$ の中に含まれすぎた余分の項を差し引いて, 第5図で与えられる1次の自己エネルギーのはんいで self-contained になる方法を考えてみよう。余分を差し引いても, (3.9) 式 (3.10) 式で与えられる s 次のキュームラントの基本的な性質は変わらず, 係数 $P_s(c)$ だけが変ることになる。したがって $P_s(c)$ の代りに $Q_s(c)$ を使うと,

$$C_s^{(1)}(p_1, p_2, \dots, p_s) = N Q_s(c) \delta(p_1 + p_2 + \dots + p_s). \quad (4.3)$$

ここで上付き(1)をつけたのは, 1次のはんいで self-contained になるようなキュームラントを意味する。排除効果は, 相互作用 V について同じ次数の全ての可能なグラフの class を考え, その class の中で, c について高次のグラフからの補正を, c の1次のグラフのバーテックスへのくり

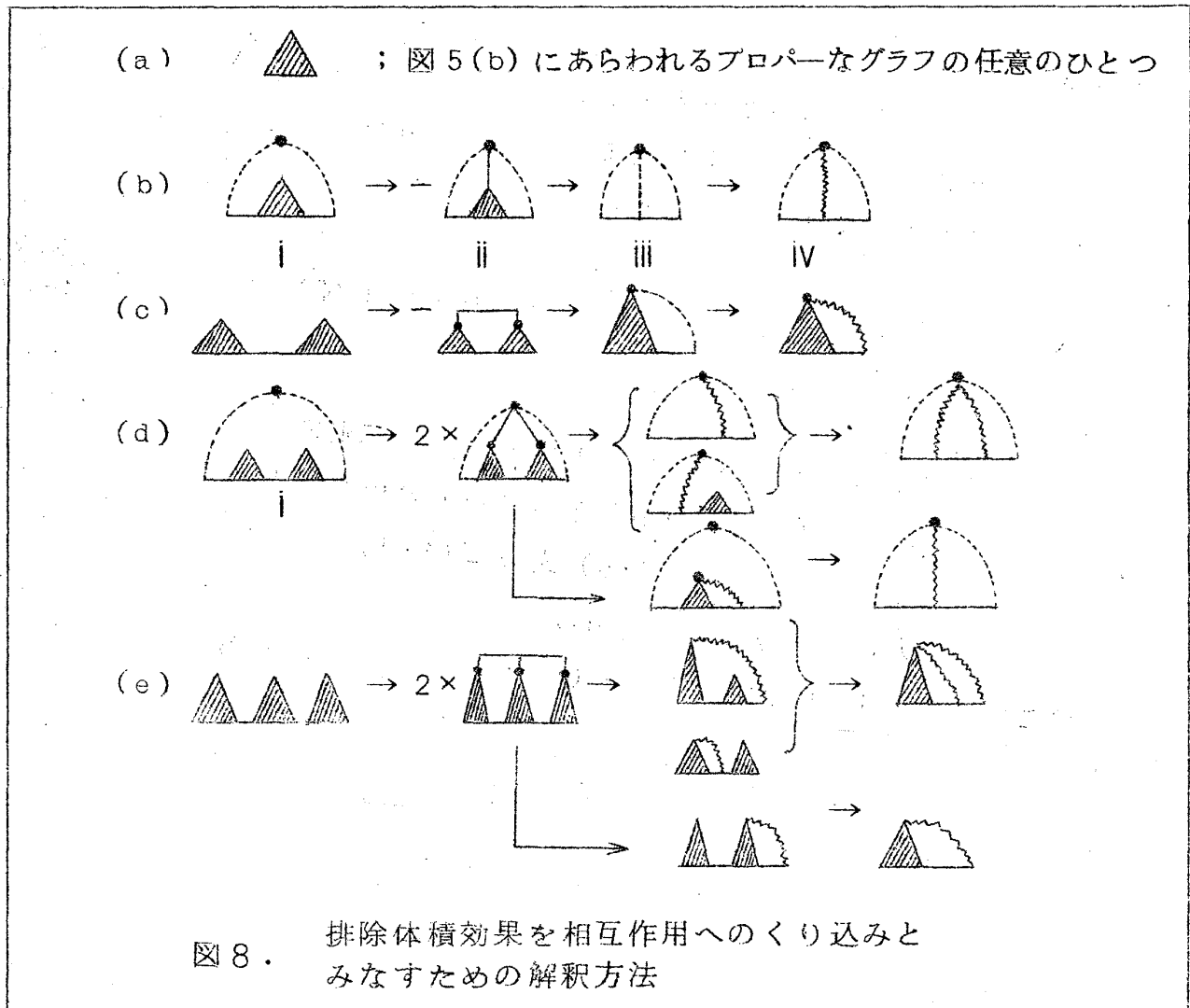
込みとして解釈できることを § 3 に示した。したがって (3・10) 式同様；

$Q_s(c)$ は低次の $Q_m(c)$ ($m < s$) を使って、

$$Q_s(c) = c - \sum_{(2)}' Q_{m_1}(c) Q_{s-m_1}(c) - \sum_{(3)}' Q_{m_1}(c) Q_{m_2}(c) Q_{s-m_1-m_2}(c) \\ \dots \dots - \sum_{(s-1)}' Q_2(c) (Q_1(c))^{s-1} - (Q_1(c))^s \quad (4.4)$$

と書ける。 $\sum'$ は、 $p_1, p_2, \dots, p_s$ を ℓ ケの組に分けて得られるグラフが、
(ℓ) 1 次の自己エネルギーに含まれているように分ける分け方の全てについての和を表わす。

$Q_s(c)$ をこのように決めて求められた 1 次の自己エネルギーを $\Sigma(1, 1)$ とするとき、この $\Sigma(1, 1)$ を求める方法を考えてみよう。self containedness の要請から、 $\Sigma(1, 1)$ には cross したグラフからの補正が含まれてはならない。この近似の場合には、排除効果をバーテックスへのくり込みと解釈するほかに、相互作用へのくり込みとして解釈することも可能である。これを第 8 図によって説明しよう。まず (a) 図に示されたグラフは第 5 (a) 図右辺にあらわれるプロパーな 1 次の自己エネルギーの任意の 1 項とする。この時、例えば (b) — i 図に示されたような、2 本の相互作用線の間の propagator に、プロパーな 1 次のグラフが入っている項からの補正は、(b) — ii 図にあらわれる形で、マイナスの符号がついて補正として含まれることになる。この補正を (b) — iii のグラフのまん中の相互作用へのくり込みと考えると、(a) のプロパーなグラフとしてあらゆる可能な 1 次の項をとって (b) — i にとり入れた補正を考慮して、(b) — vi 図のような、くり込まれた相互作用線 — 波線 — であらわすことができる。一方 (c) — i 図のグラフからの補正は、(c) — ii のグラフの形で、(c) — iii の右の方の相互作用へのくり込みとしてとり入れることができ、(c) — (vi) 図のようなグラフであらわされる。次に、(d) — i 図のように、2 本の相互作用線の間の propagator 上に、2 ケのプロパーな 1 次の自己エネルギーグラフの含まれている場合を考えてみよう。このグラフからの補正は、プラスの符号と、2 という係数をもって (d) — ii 図の形でとり入れられるべきことは、図 3 (b) 図の × 印をつけたグラフが + 2 をもってあらわれるのと同じ事情である。こ



の 2 のうち、ひとつは、(d) — III 又は (d) — III の過程をへて、(d) — V 図に示されるような相互作用線 2 本への補正と解釈でき、他のひとつは、(d) — VI の過程をへて、(d) — VII のグラフのまん中の 1 本の相互作用へのくり込みとも解釈できる。同様にして、(e) — I 図のようなグラフからの補正も、(d) 図の例の類推から、(e) — V 図及び (e) — VII 図の 2 つの項へのくり込みの形でとり入れることができる。一般に、全ての高次の、cross しないグラフからの補正をとり入れるには、(a) 図であらわされるプロパーな 1 次の自己エネルギーが、それ自体すでにくり込みを含んだものであると定義しておくと、上記の手続きで全ての必要な補正が過不足なく考りよされることになる。

この議論をふまえて、 $\mathcal{Z}(1, 1)$ の求め方を考えると、くり込みの効果を

相互作用 V へのくり込みと解釈することにより、 $\Sigma(1, 1)$ は第 9 (a) 図で与えられることがわかる。くり込まれた相互作用を波線であらわし、その波線からの寄与を $V\zeta$ とする。したがって $\Sigma(1, 1)$ は、

$$\Sigma(1, 1) = N_0 V + N_0 V Z(V\zeta) + N_0 V Z(V\zeta) Z(V\zeta) + \dots = \frac{N_0 V}{1 - ZV\zeta} \quad (4.5)$$

$\Sigma(1, 1)$ の右辺の和全体を 9 (a) 図のように二重の波線であらわし V の代りに、全てのグラフからの相互作用の効果の和という意味で $V\eta(VZ; c)$ を割当てることになると、(4.5) 式の $\Sigma(1, 1)$ は $N_0 V\eta(VZ; c)$ と書ける。一方、上記の議論から明らかなように、くり込まれた相互作用 $V\zeta$ はこの $\eta(VZ; c)$ を使って、9 (b) 図の様に定義される。

$$\begin{aligned} (a) \quad \Sigma(1, 1) &= \text{[diagram: vertical line with three semi-circles on top]} \\ &\equiv N_0 V \eta(VZ; c) \equiv \text{[diagram: vertical line with a double semi-circle on top]} \\ (b) \quad V\zeta &\equiv \text{[diagram: wavy line]} \equiv \text{[diagram: wavy line with a semi-circle]} - \text{[diagram: double wavy line]} \\ &= V(1 - c\eta(VZ; c)) \end{aligned}$$

図 9. $\Sigma(1, 1)$ の self-consistent な定義

この時、(4.4) 式の $Q_S(c)$ に対する要請がみたされることを、上に示したグラフの考察から証明できる。9 (b) 図の関係は

$$V\zeta = V - cV\eta(VZ; c) = V\{1 - c\eta(VZ; c)\} \quad (4.6)$$

となり、 ζ と $\eta(VZ; c)$ とが self consistent に決定される。すなわち

$$\eta(VZ; c) = \frac{1}{1 - VZ\{1 - c\eta(VZ; c)\}} \quad (4.7)$$

$Q_S(c)$ が具体的にどんな形になるかは、 $\Sigma(1, 1)$ に対する式を $Q_S(c)$ で

展開して

$$\mathcal{Z}(1, 1) = NV \sum_{s=1}^{\infty} Q_s(c) (ZV)^{s-1} \quad (4.8)$$

$$\text{と, } \mathcal{Z}(1, 1) = NV c \eta(VZ; c) \quad (4.9)$$

との $(ZV)^{s-1}$ の係数を比較することにより次の様に決められる。

(Appendix B 参照)

$$Q_s(c) = \sum_{m=1}^s \left[(-1)^{m-1} \frac{(s+m-2)!}{m!(s-m)!(m-1)!} \right] c^m \quad (4.10)$$

[4.4 $\mathcal{Z}(1, 1)$ が物理的に正しいことの証明]

このようにして、 $Q_s(c)$ によって決められた1次の自己エネルギー $\mathcal{Z}(1, 1)$ では $P_s(c)$ によって決められた § 3 の $\mathcal{Z}(1)$ のもつ2つの困難がとり除かれていることを証明しよう。

まず、物理的に意味のない極は $\mathcal{Z}(1, 1)$ にあらわれないことを示すために、(4.8) 式の右辺を c で展開してみよう。(4.10) 式を使うと、

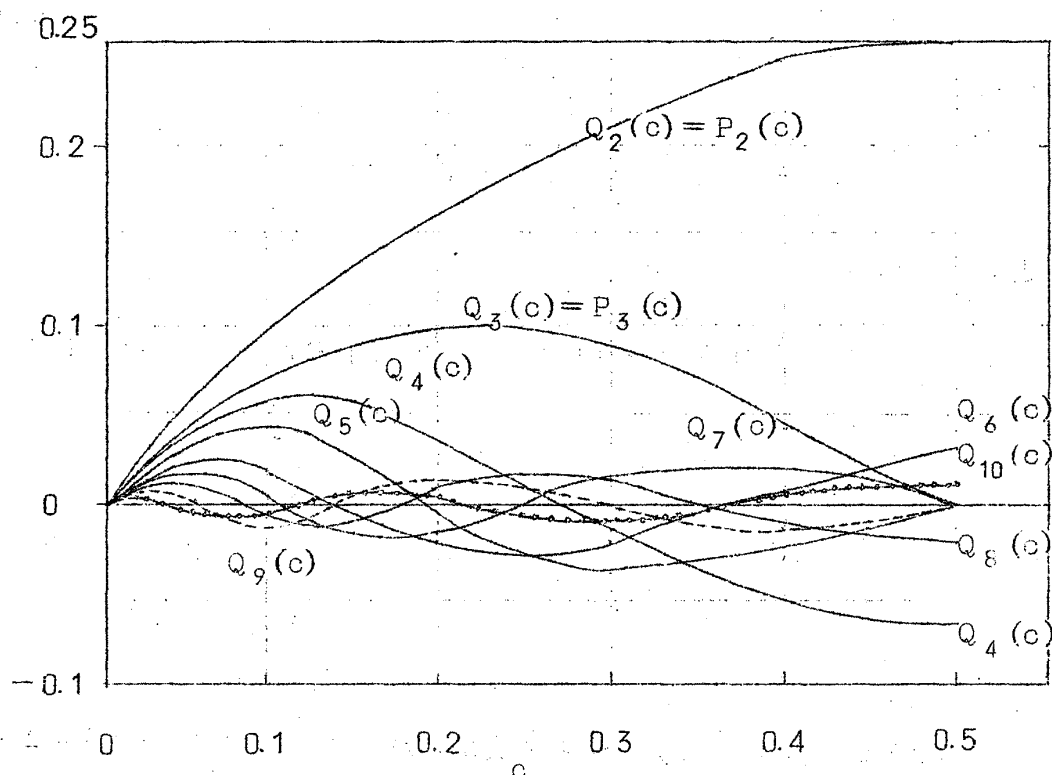
$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(1, 1) &= NV \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{m=1}^s (-1)^{m-1} \frac{(s+m-2)!}{m!(s-m)!(m-1)!} c^m (ZV)^{s-1} \\ &= NV \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^{m-1} (2m-2)!}{m!(m-1)!} \frac{(ZV)^{m-1}}{(1-ZV)^{2m-1}} \right] c^m \quad (4.11) \end{aligned}$$

したがって、 c の各べきの項の係数には、 $1 - ZV = 0$ 以外の極があらわれないことがわかり、第1の困難がとり除かれていることが証明された。

第2の困難については第1図の $Q_s(c)$ vs c 曲線から明らかなように、 $Q_s(c)$ が c と共に収れんし、(4.8) 式で与えられる級数も収れんする。

[4.5 結 論]

この様に、近似的な自己エネルギーが物理的に意味あるものであるためには、与えられた近似の各段階でキュームラントへのくり込みが self contained になっていることが必要であることがわかる。言い変えると、キュー



第10図 $Q_s(c)$ vs c curves

ームラントを定義する $Q_s(c)$ は、近似の程度によって変わってくるというのが、重要な結論である。明らかに、自己エネルギー Σ が近似なしに完全に正しく求められた場合には、 $Q_s(c) \rightarrow P_s(c)$ となる。

$Q_s(c)$ が近似の程度に応じて変ることを示すために、いま自己エネルギーとして第5 (b) 図で描かれているようなグラフばかりをひろいあげる場合を考えると、キュームラントは $Q_s^0(c) = c(1-c)^{s-1}$ で決められることを証明することができる。(証明略)

[4.6 $\Sigma(1)$ と $\Sigma(1,1)$ との関係]

最後に、§3で求められた $\Sigma(1)$ ($P_s(c)$ を使って定義されている) と、この節で求めた self contained な一次の自己エネルギー $\Sigma(1,1)$ ($Q_s(c)$ を使って定義されている) との関係を調べてみよう。ポテンシャルが δ 関数型であると、 $\Sigma(1)$ は、

$$\mathcal{Z}(1)_{kk}' = NV \delta_{kk}' [c + VZ f_1(VZ; c)] \quad (4.12)$$

但し

$$f_1(x; c) = \frac{c(1-c)}{1 - (1-2c)x + x^2 f_2(x; c)},$$

$$f_n(x; c) = \frac{n(n-1)c(1-c)}{1 - n(1-2c)x + x^2 f_{n+1}(x; c)}.$$

ここで $f_n(x; c)$ は無限に続く連分数であるが、いま第一近似として、 $f_2(x; c) = f_1(x; c)$ とおくと (4.13a) 式は $f_1(x; c)$ に対して閉じた形になり、(4.12) 式の $\mathcal{Z}(1)$ が求まる。この第 1 近似がまさしく $\mathcal{Z}(1.1)$ に一致するのである。これは又 Taylor, Onodera と Toyozawa らによって用いられた近似とも等しい。

§ 5 近似の進め方について

前節の終りで示したように、 $\mathcal{Z}(1, 1)$ は $\mathcal{Z}(1)$ の第 1 approximant に当っている。これをグラフの言葉を使って説明すると、 $\mathcal{Z}(1)$ は第 5 (a) 図で示されるような 1 次の自己エネルギーで、全ての高次のグラフからの補正を全部とり入れたものである。そのうちで第 5 図 (a) のはんいで self-contained になるグラフからの効果だけをひろいあげたのが $\mathcal{Z}(1, 1)$ である。一般に $\mathcal{Z}(1)$ は、

$$\mathcal{Z}(1) = \mathcal{Z}(1.1) + \mathcal{Z}(1.2) + \mathcal{Z}(1.3) + \cdots \quad (5.1)$$

と書くことができる。ここで $\mathcal{Z}(1.2)$ は 2 次の irreducible な cluster diagrams を含む項からの 1 次の自己エネルギーへの補正を全て加え合わせたものである。第 7 (a) 図の 5 つのグラフ、(b) 図の最初の 16 ケのグラフ等がこの category に含まれる。補正の大きさは、これらのグラフの独立な 2 つのパーツを実線をつないだものに、マイナスの符号をつけて得られる。結局 2 次のグラフからの寄与が、2 個の不純物間の距離 R の関数で書かれている時、その関数で $R=0$ とおいたものにマイナスをつければ補正が計算される。一方 $\mathcal{Z}(1, 3)$ は、3 次の irreducible cluster

米沢富美子

diagrams からの1次の自己エネルギーへの補正をあらわすもので、第7 (b) 図の最後の4つのグラフがこれにあたる。一般に $\mathcal{Z}(n, n)$ は n 次の自己エネルギーのうち、 n 次の irreducible cluster diagrams からの補正の因子のみを考慮したことを表わし、 $\mathcal{Z}(n, m)$ ($m > n$) は m 次の irreducible cluster diagrams からの n 次の自己エネルギーへの補正を表わすものとする。 n 次の自己エネルギーへの高次のグラフからの補正を全部加えたものを $\mathcal{Z}(n)$ とおくと、

$$\mathcal{Z}(n) = \mathcal{Z}(n, n) + \mathcal{Z}(n, n+1) + \mathcal{Z}(n, n+2) + \dots \quad (5.2)$$

self-contained な1次の自己エネルギーは $\mathcal{Z}(1, 1)$ であることを先に示したが、それでは2次の自己エネルギーを self contained に計算するとどんな形になるであろうか。これを $\mathcal{Z}_2(k)$ とおくと

$$\mathcal{Z}_2(k) = \mathcal{Z}(2, 2) + \mathcal{Z}(1, 2) \quad (5.3)$$

で与えられることがわかる。すなわち、2次に近似を進めるには、2次の irreducible diagrams からの寄与を self-contained なやり方で、全部ひろいあげる ($\mathcal{Z}(2, 2)$ に当る) と同時に、1次の自己エネルギーへのこれらの diagrams からの補正もとり入れねばならないのである。同様にして self-contained な3次の自己エネルギー $\mathcal{Z}_3(k)$ は、

$$\mathcal{Z}_3(k) = \mathcal{Z}(3, 3) + \mathcal{Z}(2, 3) + \mathcal{Z}(1, 3) \quad (5.4)$$

で与えられる。一般に $\mathcal{Z}(n, m)$ を第1表のように書いた時、各行を横に加え合わせた結果が $\mathcal{Z}(1)$, $\mathcal{Z}(2)$, etc. で、各列を縦に加え合わせた結果が、 $\mathcal{Z}_1(k)$, $\mathcal{Z}_2(k)$, etc. である。これまでのやり方では、第1近似として $\mathcal{Z}(1)$ をとり、以下近似を進めるにしたがって、順に $\mathcal{Z}(2)$, $\mathcal{Z}(3)$, ... をとり入れる方法が用いられて来た。しかしこの誤に計算すると近似の各段階で、(1) 物理的にイミのない極があらわれる。(2) 級数の和が収れんしない。という2つの困難がおこった。この困難は、近似の各段階で self containedness がみたまされているような取り扱いをすることによってとり除かれる。すなわち第1表の各列をたてに加え合わせた $\mathcal{Z}_1(k)$, $\mathcal{Z}_2(k)$,

$\mathcal{E}(1, 1), \mathcal{E}(1, 2), \mathcal{E}(1, 3), \mathcal{E}(1, 4), \dots$	total $\mathcal{E}(1)$
$\mathcal{E}(2, 2), \mathcal{E}(2, 3), \mathcal{E}(2, 4), \dots$	$\mathcal{E}(2)$
$\mathcal{E}(3, 3), \mathcal{E}(3, 4), \dots$	$\mathcal{E}(3)$
$\mathcal{E}(4, 4), \dots$	$\mathcal{E}(4)$
$\mathcal{E}_1(k), \mathcal{E}_2(k), \mathcal{E}_3(k), \mathcal{E}_4(k), \dots$	$\mathcal{E}$

第 1 表 自己エネルギーの近似の進め方

$\mathcal{E}_3(k), \dots$ を第 1, 第 2, 第 3 近似として採用すればよいのである。すなわち

$$\mathcal{E}_n(k) = \mathcal{E}(n, n) + \mathcal{E}(n-1, n) + \mathcal{E}(n-2, n) + \dots + \mathcal{E}(1, n) \quad (5.5)$$

もう少し詳しく示すと、例えば第 2 近似の場合には、 $\mathcal{E}(2, 2)$ は 2 つの不純物間の距り R のある関数 $F_2(R)$ を使って、

$$\mathcal{E}(2, 2) = \mathcal{E} \sum_R F_2(R) \quad (5.6)$$

と書ける。この式の右辺の R についての和には、 $R=0$ なる項（2 つの不純物が同一格子点上にあることに相当する）も含まれており、この項が物理的に意味のない極を与える原因になっている。ところが、定義そのものから明らかのように、 $\mathcal{E}(1, 2)$ というのは

$$\mathcal{E}(1, 2) = -F_2(0) \quad (5.7)$$

と書けるのである。したがって、 $\mathcal{E}_2(k)$ は結局

$$\mathcal{E}_2(k) = \mathcal{E}(2, 2) + \mathcal{E}(1, 2) = \mathcal{E} \sum_{R(\neq 0)} F_2(R) \quad (5.8)$$

となり、物理的でない極が出てこないことがわかる。このように $\mathcal{E}(1, 2)$ は $\mathcal{E}(2, 2)$ の各項のうち、物理的に許されない項を丁度うち消す働きをし

ている。

3 次の自己エネルギーの場合にもこれと同じ事情が起る。すなわち、 $\mathcal{E}(3, 3)$ は、3 つの不純物の位置の間の距り R_{12} , R_{23} , R_{31} ($= -R_{12} - R_{23}$) の関数 $F_3(R_{12}, R_{23}, R_{31})$ により

$$\mathcal{E}(3, 3) = \sum_{R_{12}, R_{23}, R_{31}} F_3(R_{12}, R_{23}, R_{31}) \delta(R_{12} + R_{23} + R_{31}) \quad (5.9)$$

という形であらわされるが、右辺の項の中で

- (i) R_{12} , R_{23} , R_{31} のいずれか1つのみが零である場合。(これは3つの不純物原子のうち、2ヶは同じ格子点上にあり、第3の原子は別の格子点上にある場合に相当する)。及び
- (ii) $R_{12} = R_{23} = R_{31} = 0$ の場合(3つの不純物原子が全て同一格子点上にある場合)。この2つの場合は物理的に正しくない項であるが、このうち(i)の項は $\mathcal{E}(2, 3)$ によって、(ii)の項は $\mathcal{E}(1, 3)$ によって丁度うち消される形になっている。

一般に $\mathcal{E}(5, 5)$ 式で与えられる self contained な n 次の自己エネルギー $\mathcal{E}_n(k)$ において、 $\mathcal{E}(n, n)$ の項のうちの物理的に意味のない項の寄与は、 $\mathcal{E}(n, n-1)$, $\mathcal{E}(n, n-2)$, ..., $\mathcal{E}(n, 1)$ によって丁度相殺されるようになっており、結局 $\mathcal{E}_n(k)$ には不合理な極があらわれない。

一方、 $\mathcal{E}_2(k)$, $\mathcal{E}_3(k)$, etc. は第4節で計算される $Q_S(0)$ を基にして作られるので、その収れん性も保証されている。

§ 6 近似と濃度の関係についての conjecture.

第2節～第4節では、自己エネルギーに対する近似が各段階で self-contained になっていなければならないことを記した。この様に正しいやり方で計算した場合の1次の自己エネルギーは $\mathcal{E}(1, 1)$ で与えられるが、これは Taylor が不規則格子の格子振動スペクトルを計算する際に使った近似である。Taylor のこの計算の結果によると、軽い原子を不純物とみなす時(これは attractive な delta 関数型ポテンシャルを不純物をみなすことに等しい。), $\mathcal{E}(1, 1)$ による結果が、Dean とか Payton と Viss

cher らの計算機実験の結果と良く合うのは、むしろ c が充分大きくて $c > c_p$ (c_p は percolation concentration) をみたすようなはんいであって、それより小さい c の領いきでは、スペクトルにあらわれる微細構造が説明されない。

これは次の様に解釈される。 $c < c_p$ のはんいでは不純物の濃度が充分大きくないため、空間的にみた時 defect-rich な部分と host-rich な部分とがあり、ポテンシャルの空間的ゆらぎが大きい。したがって、 $\mathcal{D}(1,1)$ のように、ある 1 個の不純物による散乱の効果を正しくとり入れ、その際それ以外の全ての不純物の効果を何かの平均された量 — 平均的な媒質 — とみなしてしまう近似が良くないのである。このような c に対しては、irreducible な cluster diagrams の寄与を考慮しなければならないのである。これに反して $c > c_p$ のはんいでは、不純物が空間的に充分良くひろがっていて、ポテンシャルの空間的なゆらぎが少い。したがって、全ての不純物原子のまわりの環境は似たりよったりとなり、 $\mathcal{D}(1,1)$ という近似が良くなるのである。

一方、濃度が充分小さくて、2 個以上の不純物原子による島ができる確率の少ないところでは、再び 1 個の不純物のまわりの様子にゆらぎがなくなり、 $\mathcal{D}(1,1)$ でも良い近似になることが想像される。そのような濃度から c が増し、2 個の cluster による島のできる確率が無視できないようになると、Spikes があらわれ出し $\mathcal{D}_2(k)$ までとり入れる必要が生じて来るであろう。 c がさらに大きくなると、それに応じて $\mathcal{D}_3(k)$, $\mathcal{D}_4(k)$, ... を含めねばならなくなって来る。しかし、不純物の濃度の増加に従って次第に高次の自己エネルギーをとり入れるというこの過程は無限に続くのではなくて、 c がある程度大きくなると、高次の自己エネルギーをとり入れても状態密度の形が drastic に変化しないような濃度 c に達する。 $\mathcal{D}_2(k) + \mathcal{D}_3(k) + \dots$ の効果が $\mathcal{D}_1(k)$ に比べてずっと小さくなるような濃度 c から percolation concentration c_p に対するひとつの予想値が求められるはずである。

$c < c_p$ で $\mathcal{D}_1(k)$ の近似が、状態密度の微細構造を説明できなかったのは、それが $\mathcal{D}_1(k)$ だけで間に合わせるには大きすぎる濃度領域であったためで、 $\mathcal{D}_2(k)$, $\mathcal{D}_3(k)$, ... 等を取り入れれば、微細構造はあらわれるはずである。

米沢富美子

$\Sigma_2(k)$ までとり入れた計算が目下進行中である。($\Sigma_2(k)$ の具体的な求め方については、次の論文で与えられる。)

Acknowledgement; 論文の草稿を読んで適切な助言を下された松原先生、及び有益な議論をしていただいた長谷川先生、松田先生に感謝します。

Appendix A. $P_s(c)$ の具体的な求め方

$P_s(c)$ は c についての多項式であるから一般に次のように書ける。

$$P_s(c) = \sum_{m=1}^s P_{s,m} c^m \quad (A \cdot 1)$$

したがって、(3, 11) 式より

$$\begin{aligned} g(x;c) &\equiv \log(1-c+ce^x) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{s=1}^s P_{s,\ell} c^\ell \times s/s! \\ &= \sum_{\ell=1}^{\infty} \left(\sum_{s=\ell}^{\infty} P_{s,\ell} \times s/s! \right) c^\ell \quad (A \cdot 2) \end{aligned}$$

両辺を c で n 回微分して $c=0$ とおくと、まず左辺は

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n g(x;c)}{\partial c^n} \Big|_{c=0} &= \frac{(-1)^{n-1} (n-1)! (e^x-1)^n}{(1-c+ce^x)^n} \Big|_{c=0} = (-1)^{n-1} (n-1)! (e^x-1)^n \\ &= (-1)^{n-1} (n-1)! \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-1)^{n-k} e^{kx} \quad (A \cdot 3) \end{aligned}$$

一方右辺は

$$\frac{\partial^n g(x;c)}{\partial c^n} \Big|_{c=0} = n! \sum_{s=n}^{\infty} P_{s,n} \times s/s! \quad (A \cdot 4)$$

(A・3) 式、(A・4) 式を x で s 回微分して $x=0$ とおくと、

$$(-1)^{n-1} (n-1) \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} (-1)^{n-k} k^s = n P_{s,n} \quad (\text{A} \cdot 5)$$

$$\therefore P_{s,n} = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \binom{n-1}{k-1} k^{s-1} \quad (\text{A} \cdot 6)$$

Appendix B, $Q_s(c)$ の具体的な形の求め方

(4.5) ~ (4.9) 式と図 9 とより

$$\sigma(x;c) \equiv c \eta(x;c) = \sum_{s=1}^{\infty} Q_s(c) x^{s-1} \quad (\text{B} \cdot 1)$$

$Q_s(c)$ は c の s 次の多項式であるから一般に,

$$Q_s(c) = \sum_{m=1}^s Q_{s,m} c^m \quad (\text{B} \cdot 2)$$

と書ける。したがって (B.1) 式は,

$$\begin{aligned} \sigma(x;c) &= \sum_{s=1}^{\infty} \left(\sum_{m=1}^s Q_{s,m} c^m \right) x^{s-1} \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{s=m}^{\infty} Q_{s,m} x^{s-1} \right) c^m \end{aligned} \quad (\text{B} \cdot 3)$$

となる。一方, $\sigma(x;c)$ を c で微分すると, (4.7) 式の関係を使って

$$\frac{\partial \sigma(x;c)}{\partial c} = \frac{1}{1-x(1-2\sigma(x;c))} \equiv F(x;c) \quad (\text{B} \cdot 4)$$

ここで導入された $F(x;c)$ を c について微分すると,

$$\frac{\partial F(x;c)}{\partial c} = -2xF^3(x;c) \quad (\text{B} \cdot 5)$$

(B.4) 式, (B.5) 式より $\sigma(x;c)$ の c についての n 次の導関数が,

米沢富美子

$n \geq 2$ の時次の様に書けることがわかる。

$$\frac{\partial^n \sigma(x; c)}{\partial c^n} = (-2x)^{n-1} 3, 5 \dots (2n-3) \times [F(x; c)]^{2n-1} \quad (\text{B} \cdot 6)$$

$F(x; 0) = \frac{1}{1-x}$ を使うと

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n \sigma(x; c)}{\partial c^n} \Big|_{c=0} &= \frac{(2n-3) \cancel{!} x^{n-1}}{(n-1) \cancel{!} (1-x)^{2n-1}} \\ &= \frac{(-1)^{n-1} (2n-2) \cancel{!}}{(n-1) \cancel{!}} \sum_{m=2n-2}^{\infty} {}_m C_{2n-2} x^{m-n+1} \quad (\text{B} \cdot 7) \end{aligned}$$

$$\equiv n \cancel{!} \sum_{s=n}^{\infty} Q_{s,n} x^{s-1} \quad (\text{B} \cdot 8)$$

(B・7) 式, (B・8) 式を x で $(s-1)$ 回微分して $x=0$ とおくと, 結局 $Q_{s,n}$ の具体的な表式が次のように求まる。

$$Q_{s,n} = \frac{(-1)^{n-1} (n+s-2) \cancel{!}}{(n-1) \cancel{!} n \cancel{!} (s-n) \cancel{!}} \quad (\text{B} \cdot 9)$$

文 献

- 1) 例えば, A.A.Maradudin, P.Mazur, E.W.Montrall and G.H.Weiss の review. Rev. Mod. Phys. 30 (1958), 175.
- 2) S.F.Edwards, Phil. Mag. 3 (1958), 1020.
R.Klauder, Ann. of Phys. 14 (1961), 43.
J.S.Langer, J.Math. Phys. 2 (1961), 584.
- 3) P.Dean, Proc. Roy. Soc. (London) A254 (1960), 507.
P.Dean and M.D.Bacon, Proc. Roy. Soc. 283 (1965), 64.

- 4) D.N.Payton and W.M.Visscher, Phys. Rev. 154 (1967), 802.
- 5) F.Yonezawa and T.Matsudara, Prog. Theor. Phys. 35 (1966), 357, 759.
- 6) T.Matsubara F.Yonezawa, Prog. Theor. Phys. 37 (1967), 1946.
- 7) D.W.Taylor, Phys, Rev. 156 (1967), 1017.
- 8) Onodera and Y.Toyozawa, J.Phys. Soc, Japan