数理解析研究所講究録
第115巻 1971年 216-221

Orthorhombic Lattice に対する Lattice Green's Function

東北大 工, *理　　山崎義武, *堀口剛, 守田徹

Lattice Green's Function

$$G(t;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3;l,m,n)=\frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi dx\int_0^\pi dy\int_0^\pi dz\,\frac{\cos lx\cos my\cos nz}{t-\gamma_1\cos x-\gamma_2\cos y-\gamma_3\cos z} \tag{1}$$

を考える。ここで $t=s-i\epsilon$．ϵ は infinitesimal number であり，s は実数とする。l,m,n は lattice site を表わす integer，$\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3$ は重心系の momentum, lattice spacing, anisotropy を示すパラメタである。

対称性；$G(-l)=G(l)$，$G(-\gamma_1)=(-1)^l G(\gamma_1)$，$G(-t)=-(-1)^{l+m+n}G(t)^*$ のため $\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3>0$，$s>0$ に対して (1) を考えれば十分である。

[I] Lattice Green's Function at the Origin[1)]

(1)式で z と y についての積分は容易に行えて

$$G(t;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3;0,0,0)=\frac{1}{\pi^2\sqrt{\gamma_2\gamma_3}}\int_0^\pi dx\;k\,K(k) \tag{2}$$

$$k=\left[4\gamma_2\gamma_3\Big/\left\{(t-\gamma_1\cos x)^2-(\gamma_3-\gamma_2)^2\right\}\right]^{1/2} \tag{3}$$

と表わされる。

$t = s - i\epsilon\ (\epsilon \geq 0)$ とおいて k を complex number と考える. complex k に対する $K(k)$ の解析性は文献[1]に従うと, $k = k_R + i\epsilon$ のとき

$$K(k) = \frac{1}{k}\left[K\left(\frac{1}{k}\right) + iK\left(\frac{\sqrt{k^2-1}}{k}\right)\right] \quad \text{for} \quad k_R > 1 \tag{4}$$

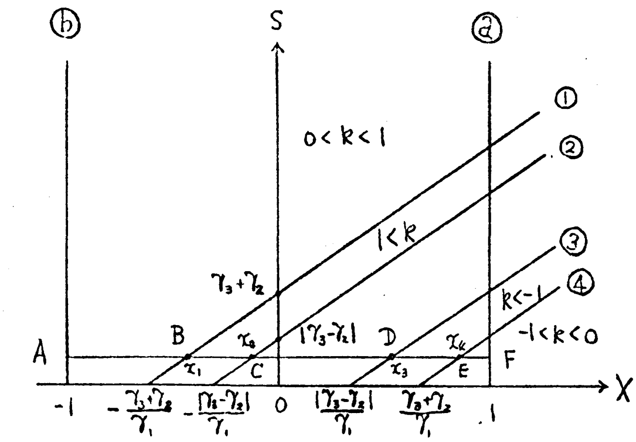
$$K(k) = \frac{1}{|k|}\left[K\left(\frac{1}{k}\right) - iK\left(\frac{\sqrt{k^2-1}}{k}\right)\right] . \quad \text{for} \quad k_R < -1 \tag{5}$$

又, $k = \pm\epsilon + i k_I$ のとき

$$K(ik_I) = \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\, K\left(\frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) \tag{6}$$

である.

(3)により



Line① < s のとき [0<k<1]

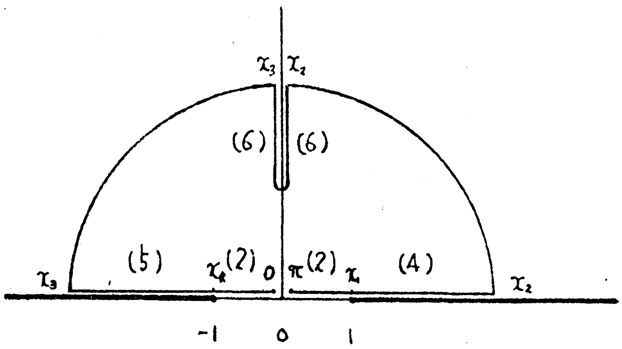
Line② < s < Line① のとき [1<k]

Line③ < s < Line② のとき [k_I]

Line④ < s < Line③ のとき [k<-1]

s < Line④ のとき [-1<k<0]

である. ただし, これらの線上での s の値は $X \equiv \cos x$ とおくと



Line①; $s = \gamma_1 X + (\gamma_3 + \gamma_2)$

Line②; $s = \gamma_1 X + |\gamma_3 - \gamma_2|$

Line③; $s = \gamma_1 X - |\gamma_3 - \gamma_2|$

Line④; $s = \gamma_1 X - (\gamma_3 + \gamma_2)$

である。

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ の値から $X=1, X=-1$ を表わす line ⓐ, ⓑ が定まる。

S が与えられると X を $|k|<1$, $k_R>1$, $k_R<-1$ と $k=ik_I$ の領域に分けられる。例えば, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, S$ が与えられたとき ⓐ, ⓑ, AF の関係が上図のように得られたとすると, このときの complex k plane は下図が対応する。カッコの数字は対応する式の番号である。

(4), (5), (6) を夫々の領域について考慮すると

$$G(S-i\epsilon) = G_R(S) + i\,G_I(S) \tag{7}$$

$$G_R(S) = \frac{1}{\pi^2\sqrt{\gamma_2\gamma_3}}\left[-\int_0^{x_4} dx\, k\, K(|k|) - \int_{x_4}^{x_3} dx\, K\left(\frac{1}{|k|}\right) + \int_{x_2}^{x_1} dx\, K\left(\frac{1}{k}\right) + \int_{x_1}^{\pi} dx\, k\, K(k)\right] \tag{8}$$

$$G_I(S) = \frac{1}{\pi^2\sqrt{\gamma_2\gamma_3}}\left[\int_{x_4}^{x_3} dx\, K\left(\frac{\sqrt{k^2-1}}{|k|}\right) + \int_{x_3}^{x_2} dx\, \frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \int_{x_2}^{x_1} dx\, K\left(\frac{\sqrt{k^2-1}}{k}\right)\right] \tag{9}$$

が得られる。このようにして, 任意の $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, S$ に対して, Lattice Green's Function の表式 (2) からそれを $K(k)$, $0<k<1$ で表わす表式が得られる。この公式により得られた曲線の代表的なものが文献[1]に与えられている。

[II] Lattice Green's Function at an Arbitrary Lattice Site[2]

Rectangular (R) Lattice と Orthorhombic (O) Lattice に対する任意の格子点での Lattice Green's Function の求め方を考える。

(IIa) R. Lattice

R. Lattice は (1) で $l=0$, $\gamma_1=0$ とおいたものと考えてよい。まず, y 軸上の Lattice Green's Function

$$G_2(t; m, 0; \gamma_2, \gamma_3) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} dy\, \frac{\cos my}{\sqrt{(t-\gamma_2\cos y)^2 - \gamma_3^2}} \tag{10}$$

を求める．関数 $F(\xi,\zeta,m)$ を

$$F(\xi,\zeta,m)\equiv\int_0^{\pi}d\gamma\,\frac{\cos m\gamma}{\sqrt{\pm(\xi-\cos\gamma)(\zeta-\cos\gamma)}}\tag{11}$$

で導入すると，recurrence formula

$$F(m+2)=(\xi+\zeta)\left[\frac{2m+1}{m+1}F(m+1)+\frac{2m-1}{m+1}F(m-1)\right]-\frac{2m}{m+1}(2\xi\zeta+1)F(m)-\frac{m-1}{m+1}F(m-2)\tag{12}$$

が成立つ。これを用いると

$$G_2(t;m,0;\gamma_2,\gamma_3)=\frac{1}{\pi\gamma_2}F(\xi,\zeta;m),\qquad \xi=\frac{t+\gamma_3}{\gamma_2},\ \zeta=\frac{t-\gamma_3}{\gamma_2}\ \text{for}\ \gamma_2\neq 0\tag{13}$$

$$G_2(t;m+2,0)=\frac{2t}{\gamma_2}\left\{\frac{2m+1}{m+1}G_2(t;m+1,0)+\frac{2m-1}{m+1}G_2(t;m-1,0)\right.$$
$$\left.-\frac{2m}{m+1}\,\frac{2t^2-2\gamma_3^2+\gamma_2^2}{\gamma_2^2}G_2(t;m,0)-\frac{m-1}{m+1}G_2(t;m-2,0)\right\}\tag{14}$$

を得る。従って，軸上のすべての Lattice Green's Function は $m=0,1,2$ に対する Green's Functions

$$G_2(t;0,0;\gamma_2,\gamma_3)=\frac{2}{\pi\gamma_2\sqrt{(\xi-1)(\zeta+1)}}K(k),\qquad k^2=\frac{2(\xi-\zeta)}{(\xi-1)(\zeta+1)}\tag{15}$$

$$G_2(t;1,0;\gamma_2,\gamma_3)=\frac{2}{\pi\gamma_2\sqrt{(\xi-1)(\zeta+1)}}\left[\xi K(k)-(\xi+1)\Pi\left(\frac{-2}{\xi-1},k\right)\right]\tag{16}$$

$$G_2(t;2,0;\gamma_2,\gamma_3)=\frac{2}{\pi\gamma_2\sqrt{(\xi-1)(\zeta+1)}}\left[\xi K(k)+(\xi-1)(\zeta+1)E(k)\right.$$
$$\left.-(\xi+\zeta)(\xi+1)\Pi\left(\frac{-2}{\xi-1},k\right)\right]\tag{17}$$

から求められる．

γ軸上の値から次のγ軸に平行な直線上の値は

$$G_2(t;m,1)=\left[2tG_2(t;m,0)-2\delta_{m,0}-\gamma_2G_2(t;m+1,0)-\gamma_2G_2(t;m-1,0)\right]/2\gamma_3\tag{18}$$

により求められる。一般に，γ軸に平行な$n+1$番目の直線上の値は，nと$n-1$番目の直線上の値から次の式により求められる．

$$G_2(t;m,n+1)=\left[2tG_2(t;m,n)-\gamma_2G_2(t;m+1,n)-\gamma_2G_2(t;m-1,n)-\gamma_3G_2(t;m,n-1)\right]/\gamma_3\tag{19}$$

このようにして，R. Lattice Green's Function のすべての格子点

での値が計算できる.

(IIb) O. Lattice

O. Lattice Green's Function は R. Lattice Green's Function を用いて

$$G(t;l,m,n)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}dx\cos lx\, G_2(t-\gamma_1\cos x;m,n;\gamma_2,\gamma_3) \qquad (20)$$

と表わされる。G_2 を数値積分して x-y 面上の Green's Function $G(t;l,m,0)$ が既知となると,第1番目の面上の Green's Function は

$$G(t;l,m,1)=[2tG(t;l,m,0)-2\delta_{l,0}\delta_{m,0}-\gamma_1G(t;l+1,m,0)-\gamma_1G(t;l-1,m,0)$$
$$-\gamma_2G(t;l,m+1)-\gamma_2G(t;l,m-1,0)]/2\gamma_3 \qquad (21)$$

により計算できる.一般に,n+1 (n≥1) 番目の面の Green's Function は n と n-1 番目の面の Green's Function から次の式により計算される.

$$G(t;l,m,n+1)=[2tG(t;l,m,n)-\gamma_3G(t;l,m,n-1)-\gamma_1G(t;l+1,m,n)$$
$$-\gamma_1G(t;l-1,m,n)-\gamma_2G(t;l,m+1,n)-\gamma_2G(t;l,m-1,n)]/\gamma_3 \qquad (22)$$

このようにして,O. Lattice Green's Function は R. Lattice Green's Function の積分,(20)式を用いてすべての格子点で計算できる.計算結果については別の機会に報告したい。

文　献

1) T. Horiguchi, Y. Yamazaki and T. Morita,
Lattice Green's Function for the Orthorhombic Lattice in Terms of the Complete Elliptic Integral. J. Math. Phys. (1971) to appear.

2) Y. Yamazaki and T. Morita,
Useful Procedure for Computing the Lattice Green's Function
— Rectangular and Orthorhombic Lattice .
in preparation