数理解析研究所講究録
第130巻 1971年 1-66

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原点および $l.m.n.$ の任意の値に対し. 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. Japan 等に投稿[1-14]したが此度 Mannari さんのお陰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ったことは残念であるが，最近送られて来た preprint[13] 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 ref. 1 に与えたので（なお refs. 15, 16 参照）ここでは格子 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 $\psi(r)$ に対して

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

で与えられる。 Green 関数 $G(r, r')$ は

$$\frac{1}{2}\Delta G(r, r') + EG(r, r') = -\delta(r - r') \qquad (2.2)$$

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

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

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

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

$$\frac{1}{2}\sum_{\Delta}\phi(\underset{\sim}{r} + \underset{\sim}{\Delta}) + \left(E - \frac{z}{2}\right)\phi(\underset{\sim}{r}) = 0 \qquad (2.5)$$

$$\frac{1}{2}\sum_{\Delta}G(\underset{\sim}{r} + \underset{\sim}{\Delta}) + \left(E - \frac{z}{2}\right)G(\underset{\sim}{r}) = \delta_{\underset{\sim}{r},0} \qquad (2.6)$$

が得られる。（ 6 ）をみたすGを格子Green関数という．ここで $\underset{\sim}{r}$ = (l, m, n) で Δ は最近接格子ベクトル即ちsc，bcc，fccに対して

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

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

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

である。（ 5 ）に

$$\phi(\underset{\sim}{r}) = e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}} \tag{2.10}$$

$$\underset{\sim}{k} = (x, y, z) \tag{2.11}$$

$$\underset{\sim}{r} = (l, m, n) \tag{2.12}$$

をいれ（ 7 ）（ 8 ）（ 9 ）を考慮すると（ 5 ）の固有値として

$$E_{\underset{\sim}{k}} = 3 - \cos x - \cos y - \cos z \quad \text{sc} \tag{2.13}$$

$$E_k = 4(1 - \cos x \cos y \cos z) \quad \text{bcc} \tag{2.14}$$

$$E_k = 2(3 - \cos x \cos y - \cos y \cos z - \cos z \cos x) \quad \text{fcc} \tag{2.15}$$

を得る．周期的境界条件 $\phi(\underset{\sim}{r}+L\underset{\sim}{\Delta})=\phi(\underset{\sim}{r})$ より $\underset{\sim}{k}=2\pi\underset{\sim}{\lambda}/L$,

$\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z = 0, 1, 2, \cdots L-1$ が得られる．

次に

$$G(E,\underset{\sim}{r})=\frac{1}{N}\sum A_k e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}} \qquad N=L^3 \tag{2.16}$$

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

$$A_{\underset{\sim}{k}}=\frac{1}{E-E_k} \tag{2.17}$$

が得られる。即ち

$$G(E,r)=\frac{1}{N}\sum\frac{1}{E-E_k}e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}} \tag{2.18}$$

である．いま

$$\mathbb{H}_0 G(r,s)=-\frac{1}{2}\sum_{\Delta}G(r+\Delta,s)+\frac{z}{2}G(r,s) \tag{2.19}$$

と書くと（5），（6），（18）は

$$\mathbb{H}_0\phi_k^{(0)}(r)=E_k^{(0)}\phi_k^{(0)}(r) \tag{2.20}$$

$$(\mathbb{H}_0-E)G^{(0)}(r,s)=\delta_{rs} \tag{2.21}$$

$$G^{(0)}(r,s)=\frac{1}{N}\sum_k\frac{\phi_k^{(0)*}(s)\,\phi_k^{(0)}(r)}{E-E_k^{(0)}} \tag{2.22}$$

$$\mathbb{G}^{(0)}=\frac{1}{E-\mathbb{H}_0} \tag{2.23}$$

と書くことが出来る。（20）（21）（22）（23）は $\mathbb{H}_0$ の explicit な形によらないから

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_0 + \mathbb{V} \tag{2.24}$$

に対して $\mathbb{H}$ の規格化された固有関数を $\phi_k(r)$ とすると

$$\mathbb{H}\phi_k(r) = E_k\phi_k(r) \tag{2.25}$$

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

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

$$\mathbb{G} = \frac{1}{E - \mathbb{H}} \tag{2.28}$$

$$= \frac{1}{E - \mathbb{H}_0 - \mathbb{V}} \tag{2.29}$$

$$= \frac{1}{E - \mathbb{H}_0} + \frac{1}{E - \mathbb{H}_0}\mathbb{V}\frac{1}{E - \mathbb{H}_0 - \mathbb{V}} \tag{2.30}$$

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

が成立つ、これをDysonの方程式という．（31）より

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

が成立つ。

格子グリーン関数 $G(E \pm i\epsilon, 0)$, $\epsilon \to 0$ 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

$$\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\, G(E - i\epsilon, 0) = \frac{1}{N} \sum \delta(E - E_{\underset{\sim}{k}}) \tag{2.33}$$

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

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

$$I_{ortho}(a; l, m, n; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$$

$$= \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{\cos lx \cos my \cos nz \, dx dy dz}{a - \gamma_1 \cos x - \gamma_2 \cos y - \gamma_3 \cos z} \tag{2.34}$$

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

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

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

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

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

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

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

(33)のGとは

$$I_{sc}(a;l,m,n) = -G(E,\underset{\sim}{n}),\ a-3 = -E+i\epsilon \qquad (2.41)$$

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

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

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

で結ばれる。（34）における γ_1, γ_2, γ_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-Kawabata[18]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 Walk[19]

d次元空間の lattice point 上の random walk を考える。walker は nearest neighbor lattice point にのみ移りうるとする。lattice point を

$$\underset{\sim}{m} = (m_1, m_2, \cdots m_d)$$

とする。$P(\underset{\sim}{m}; \nu)$ を ν step の後に walker が点 $\underset{\sim}{m}$ に存在する確率とする。$\frac{1}{2}\gamma_j$ を $(m_1, \cdots m_j \cdots)$ から $(m_1, \cdots m_j \pm 1, \cdots)$ にうつる確率 $(\sum \gamma_j = 1)$ とすると

$$P(m_1, \cdots m_d; \nu+1)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d} \gamma_j \left[P(m_1 \cdots, m_j + 1, \cdots m_d; \nu) \right.$$

$$\left. + P(m_1 \cdots m_j - 1, \cdots m_d; \nu) \right] \qquad (3.1)$$

が成立つ。periodic boundary condition (d次元 torus 上の randam walk)

$$P(m_1 + l_1 N, m_2 + l_2 N, \cdots m_d + l_d N; \nu) \qquad (3.2)$$

$$= P(m_1, \cdots m_d; \nu)$$

(l_j は整数)を課する。いま

$$P(\underset{\sim}{m}, \nu) = x^\nu N^{-\frac{N}{2}} \exp\{2\pi i(\underset{\sim}{s}, \underset{\sim}{m})/N\} \qquad (3.3)$$

$$\underset{\sim}{s} = (s_1, \cdots s_d), \quad s_j = 1, 2 \cdots N.$$

とおき（3）を（1）に入れ（2）を用いると

$$x(s_1,\cdots s_k)=\sum_{j=1}^{d} r_j \cos(2\pi s_j/N) \tag{3.4}$$

となる。これが一つの（1）の特別解であるから一般解はその重なりとして

$$P(\underset{\sim}{m};\nu)=\sum_{s_1\cdots s_d=1}^{N} a(s_1,\cdots s_d)$$

$$\times [x(s_1,\cdots s_d)]^{\nu} N^{-\frac{d}{2}} \exp[2\pi i(\underset{\sim}{s}\cdot\underset{\sim}{m})/N] \tag{3.5}$$

で与えられる。$\nu=0$ を入れると $a(s_1,\cdots s_d)$ 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 $P(\underset{\sim}{m};0)\equiv P(\underset{\sim}{m})$ の Fourier 成分であることが分る。即ち

$$a(s_1,\cdots s_d)=N^{-\frac{d}{2}}\sum P(m_1\cdots m_d)\exp[-2\pi i(\underset{\sim}{s}\cdot\underset{\sim}{m})/N] \tag{3.6}$$

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

$$P(\underset{\sim}{m},\underset{\sim}{m}';\nu)=N^{-d}\sum_{s_1\cdots s_d=0}^{N}\left\{\sum_{j=1}^{d} r_j\cos(2\pi s_j/N)\right\}^{\nu}$$

$$\times \exp\{2\pi i\,\underset{\sim}{s}\cdot(\underset{\sim}{m}-\underset{\sim}{m}')/N\} \tag{3.7}$$

で与えられる。無限に大きな系では　$N\to\infty$ として

$$P(\underset{\sim}{m},\underset{\sim}{m}';\nu)=\frac{1}{(2\pi)^d}\int_0^{2\pi}\cdots\int\left\{\sum r_j\cos k_j\right\}^{\nu}$$

$$\times \exp[i\underset{\sim}{k}\cdot(\underset{\sim}{m}-\underset{\sim}{m}')]\,d\underset{\sim}{k} \tag{3.8}$$

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

$$G(\underset{\sim}{n},y)=\sum_{\nu=0}^{\infty}P(\underset{\sim}{n},\nu)y^{-\nu}$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^{d}}\int_{0}^{2\pi}\cdots\int\frac{\exp(i\underset{\sim}{n}\cdot\underset{\sim}{k})\,dk_1\cdots dk_d}{y-\sum_{j=1}^{d}r_j\cos k_j} \quad (3.9)$$

$$=y\int_0^{\infty}\prod_{j=1}^{d}\left[e^{-\alpha y r_j}\ I_{n_j}(\alpha r_j)\right]d\alpha$$

ここに

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

特に ν step の後原点にもどる確率の母関数は

$$G(0,y)=y\frac{1}{(2\pi)^d}\int_0^{2\pi}\cdots\int\frac{dk_1\cdots dk_d}{y-\sum_1^d r_j\cos k_d}$$

$$=y\int_0^{\infty}\prod_{j=1}^{d}\left[e^{-\alpha y r_j}I_0(\alpha r_j)\right]d\alpha \quad (3.10)$$

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．

Kotera[46]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 r と $M_0 < M\frac{1+r}{2}$ 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 だけ異った場合と mass と force const が共に異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 $\underset{\sim}{n}$ にある原子の変位を $\underset{\sim}{u}_{\underset{\sim}{n}}$ とすると harmonic model において運動の energy 及びポテンシアルエネルギーは夫々

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

$$V=\frac{1}{2}\sum_{n}^{N}\sum_{\Delta}^{z}K(\underset{\sim}{u}_{\underset{\sim}{n}}-\underset{\sim}{u}_{\underset{\sim}{n}+\underset{\sim}{\Delta}})^2$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{n}^{N}\sum_{\Delta}^{z}K(u_n^x-u_{n+\Delta}^x)^2+K(u_n^y-u_{n+\Delta}^y)+K(u_n^z-u_{n+\Delta}^z)^2 \quad (4.2)$$

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

$$V = \frac{1}{2} \sum_{r,s} \sum_{\alpha\beta} K_{rs}^{\alpha\beta} u_r^{\alpha} u_s^{\beta} \qquad \alpha, \beta = x, y, z \qquad (4.3)$$

と書くことが出来る。nearest neighbor interaction の場合においては変位の x, y, z 成分は独立であり $K^{\alpha\beta}=0$ $(\alpha \neq \beta)$ と仮定すると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_r^x を u_r と記し，$u_r^y = u_r^z = 0$ とおくと運動方程式は

$$M\ddot{u}_r = -\frac{\partial V}{\partial u_r}$$

$$= \sum_{\Delta}^{z} K(u_{r+\Delta} - u_r)$$

$$= \sum_{\Delta}^{z/2} K(u_{r+\Delta} - 2u_r + u_{r-\Delta}) \qquad (4.4)$$

ここで

$$u_r = \phi_r e^{i\omega t} \qquad (4.5)$$

とおくと

$$\sum^{z} K(\phi_{r+\Delta} - \phi_r) + M\omega^2 \phi_r = 0 \qquad (4.6)$$

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 $\phi_r = e^{ik\cdot r}$ とおくと

$$M\omega^2 - M\omega^2(k) = 0 \qquad (4.7)$$

ここに

$$M\omega^2(k) = Kz - Kz\gamma(k) \tag{4.8}$$

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

ただし（2.5）では　$\phi_{r+\Delta} - 2\phi_r + \phi_{r+\Delta}$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

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

で与えられることがわかる．

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

である．

次にmassだけ異った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

$$\sum^{z} K(\phi_{r+\Delta} - \phi_r) + M\omega^2\phi_r = 0 \qquad (r \neq 0) \tag{4.12}$$

$$\sum^{z} K(\phi_\Delta - \phi_0) + M_0\omega^2\phi_0 = 0 \tag{4.13}$$

で与えられるがこれはまとめて書くと

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

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

$$\phi_{\underset{\sim}{r}} = \frac{1}{N}\sum_k \frac{e^{ikr}}{M\omega^2 - M\omega^2(k)}(M-M_0)\omega^2\phi_0 \quad (4.15)$$

となる。ここで $\underset{\sim}{r} = 0$ とおくと

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

$\omega^2 > \omega^2(k)$ に解があればこれは localized mode の振動数を与える。sc, bcc に対しては右辺は有界であるから 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, Morita[5] により示されたように $G(E) \to \infty$ as $E \to 1$ であるのでほんの僅かでも軽い impurity が入れば 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 $V = (M-M_0)\omega^2 \equiv \lambda\omega^2$ として

$$G_{rs}(\omega^2) = G^{(0)}_{rs} + \frac{\lambda\omega^2 G^{(0)}_{r0}(\omega^2) G^{(0)}_{0s}(\omega^2)}{1-\lambda\omega^2 G^{(0)}_{00}(\omega^2)} \quad (4.17)$$

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。

摂動系の Green 関数 G_{rs} は (2.22) により

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

である。(kは全系の固有状態)

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

とおくと

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

が成立つ. 全系の状態密度は

$$g(E) = \frac{1}{N}\sum_{k} \delta(E - E_k)$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{r} g_{rr}(E) \tag{4.21}$$

であるから

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

故に

$$N g(E) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\;\mathrm{Tr}\;\mathbb{G}(E - i\epsilon) \tag{4.23}$$

である。

(2.33) より

$$-\frac{d}{dE}\,G^{(0)} = \frac{1}{(E - \mathbb{H}_0)^2} = \mathbb{G}^{(0)}\,\mathbb{G}^{(0)} \tag{4.24}$$

であるから

$$\sum G^{(0)}_{m\ell} G^{(0)}_{\ell n} = -\frac{d}{dE} G^{(0)}_{mn} \qquad (4.25)$$

が成立つ．摂動が原点だけに作用している場合 (2.32) より

$$\mathrm{Tr}\, G = \mathrm{Tr}\, G^{(0)} + \frac{V}{1-G^{(0)}_{00}V} \sum_n G^{(0)}_{n0} G^{(0)}_{0n} \qquad (4.26)$$

$$= \mathrm{Tr}\, G^{(0)} - \frac{V}{1-G^{(0)}_{00}V} \frac{d}{dE} G^{(0)}_{00}$$

$$= \mathrm{Tr}\, G^{(0)} + \frac{d}{dE} \ln (1 - VG^{(0)}_{00}) \qquad (4.27)$$

これを (23) にいれると

$$g(E) = g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \mathrm{Im} \frac{V \frac{d}{dE} G^{(0)}_{00}(E - i\epsilon)}{1 - VG^{(0)}_{00}(E - i\epsilon)} \qquad (4.28)$$

$$= g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \mathrm{Im} \frac{V \frac{d}{dE} \mathrm{Re}\, G^{(0)}_{00}(E) + \frac{d}{dE} \mathrm{Im}\, G^{(0)}_{00}(E)}{1 - V\mathrm{Re}\, G^{(0)}_{00}(E) - iV\mathrm{Im}\, G^{(0)}_{00}(E)} \qquad (4.28')$$

$$= g_0(E)$$

$$- \frac{1}{\pi N} \frac{V^2\left(\frac{d}{dE}\mathrm{Re}\, G^{(0)}_{00}(E)\right)\mathrm{Im}\, G^{(0)}_{00}(E) + V[1 - V\mathrm{Re}\, G^{(0)}_{00}(E)]\left(\frac{d}{dE}\mathrm{Im}\, G^{(0)}_{00}(E)\right)}{[1 - V\mathrm{Re}\, G^{(0)}_{00}(E)]^2 + [V\mathrm{Im}\, G^{(0)}_{00}(E)]^2} \qquad (4.29)$$

第2項は impurity による状態密度への寄与を示す。これは

$$1 - V\mathrm{Re}\, G^{(0)}_{00}(E) = 0 \qquad (4.30)$$

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$\mathcal{R}e\, G_{00}^{(0)}(E)$を展開すると

$$\mathcal{R}e\, G_{00}^{(0)}(E) = \frac{1}{V} + F'(E_0)(E-E_0) + \cdots \tag{4.31}$$

これを(29)にいれると

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

ここに

$$\Gamma_0(E) = -\frac{\mathcal{I}m\, G_{00}^{(0)}(E_0)}{F'(E_0)} \tag{4.33}$$

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

$$g(E) = g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \mathcal{I}m \frac{\frac{d}{dE} \mathcal{R}e\, G_{00}^{(0)}(E)}{1 - V \mathcal{R}e\, G_{00}^{(0)}(E)}$$

$$= g_0(E) - \frac{1}{\pi N} \mathcal{I}m \frac{1}{E-E_0} \tag{4.34}$$

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

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 $\phi_r(=G^{(0)}_{r0})$ 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 ϕ_r = 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．

$K^{\alpha\beta}$ 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 $3N\times3N$ 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

$$G^{\alpha\beta}_{rs}(t-t')=-i\theta(t-t')\langle[u^\alpha_r(t),\ u^\beta_s(t')]\rangle \qquad (4.36)$$

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来る．

§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 $r=(x,y,z)$ に対し $x+y+z=\mathrm{even}, \mathrm{odd}$ 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 $u_r \equiv \phi_r e^{i\omega t}$, $v_r = \psi_r e^{i\omega t}$ 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

$$m_1 \ddot{u}_r = \sum_{\Delta}^{z} K(v_{r+\Delta} - u_r) \tag{5.1}$$

$$m_2 \ddot{v}_r = \sum_{\Delta} K(u_{r+\Delta} - v_r) \tag{5.2}$$

であるから

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

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

が成立つ

$$\phi_r = Ae^{ikr} \qquad \psi_r = Be^{ikr} \tag{5.5}$$

をいれ

$$\sum_{\Delta}^{z} e^{ik\Delta} = z\gamma_k \tag{5.6}$$

とおくと

$$Kz\gamma_k A + (m_1\omega^2 - zK)B = 0 \tag{5.7}$$

$$(m_2\omega^2 - zK)A + Kz\gamma_k B = 0 \tag{5.8}$$

（7）（8）より振動数ωは

$$(m_1\omega^2 - zK)(m_2\omega^2 - zK) - K^2z^2\gamma_k^2 = 0 \qquad (5.9)$$

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

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

$$\omega_1 = zK\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) \qquad (5.11)$$

$$\omega_2 = \frac{zK}{m_2} \qquad (5.12)$$

$$\omega_3 = zK\frac{1}{m_1} \qquad (5.13)$$

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

で $\omega_1>\omega>\omega_2$ が optical band, $\omega_3>\omega>\omega_4$ が acoustical band である（$m_1>m_2$ とした）。

いま

$$(m^*\omega^2 - Kz)^2 = (m_1\omega^2 - Kz)(m_2\omega^2 - Kz) \qquad (5.15)$$

で定義される有数質量 m^* を定義すると（9）は

$$m^*\omega^2 = Kz \pm Kz\gamma(k) \qquad (5.16)$$

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

$$\sum_{\Delta}^{z} K(\psi_{r+\Delta} - \phi_r) + m_1 \omega^2 \phi_r = (m_1 - M)\omega^2 \phi_0 \qquad (5.17)$$

$$\sum_{\Delta}^{z} K(\phi_{r+\Delta} - \psi_r) + m_2 \omega^2 \psi_r = 0 \qquad (5.17')$$

いま

$$\phi_r = \frac{1}{N} \sum A_k e^{ikr} \qquad (5.18)$$

$$\psi_r = \frac{1}{N} \sum B_k e^{ikr} \qquad (5.18')$$

とおくと

$$(m_1 \omega^2 - Kz) A_k + zK\gamma(k) B(k) = (m_1 - M)\omega^2 \phi_0 A_k \qquad (5.19)$$

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

故に

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

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

(20) を (18) に入れ $r=0$ とおくと

$$\frac{1}{(m_1-M)\omega^2} = \frac{1}{2}\,\frac{m_2\omega^2-Kz}{[m^*\omega^2-Kz\;]}\left[\frac{1}{N}\sum\frac{1}{m^*\omega^2-Kz-Kz\gamma(k)}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{N}\sum\frac{1}{m^*\omega^2-Kz+Kz\gamma(z)}\right]$$

$$= \frac{1}{[(m_1\omega^2-Kz)(m_2\omega^2-Kz)]^{1/2}}\,\frac{1}{N}\sum\frac{1}{m^*\omega^2-Kz-Kz\gamma(k)} \qquad (5.21)$$

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 ϕ_r, ψ_r 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 momatomic 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 の間の 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

$$\sum_{\Delta} K(\phi_{n+\Delta'} - \phi_n) + M\omega^2 \phi_n$$

$$= \delta_{n0}\left\{\sum_{\Delta'}(K-K_0)(\phi_{\Delta'} - \phi_0) + (M-M_0)\omega^2\phi_0\right\}$$

$$+\sum_{\Delta}\delta_{n\Delta'}(K-K_0)(\phi_0 - \phi_\Delta) \qquad (6.1)$$

となる。これは原点に source ρ_0, 点 Δ ($\Delta = 1, 2, \cdots Z$) に source ρ_Δ, 但し

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

$$\rho_\Delta = \kappa(\phi_0 - \phi_\Delta) \qquad (6.3)$$

$$\kappa = K - K_0,$$
$$\mu = M - M_0$$

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

$$A_k = \frac{1}{M\omega^2 - zK(1-\gamma_k)} \tag{6.4}$$

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

として

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

である．無摂動系の Green 関数 $G^{(0)}_{mn}$

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

を用いると

$$\phi_n = \left[\sum_{\Delta'} K(\phi_{\Delta'} - \phi_0) + \mu\omega^2\phi_0\right] G^{(0)}_{n0}$$
$$+ \sum_{\Delta'} K(\phi_0 - \phi_{\Delta'}) G^{(0)}_{n\Delta'} \tag{6.7}$$
$$= \left[(-zK + \mu\omega^2) G^{(0)}_{n0} + \sum_{\Delta'} K G^{(0)}_{n\Delta'}\right]\phi_0$$
$$+ \sum_{\Delta'} K (G^{(0)}_{n0} - G^{(0)}_{n\Delta'})\phi_{\Delta'} \tag{6.7'}$$

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 $n=0$, Δ の $z+1$ 個の未知数を定める方程式でもある。その場合

$$\phi_n = \sum_m \sum_l G^{(0)}_{nm} V_{ml} \phi_l \tag{6.8}$$

$$V_{ml} = (-zK + \mu\omega^2)\delta_{m0}\delta_{l0} + K(\delta_{m0} + \delta_{n0} - 2\delta_{m0}\delta_{n0}) \tag{6.9}$$

と書ける。行列記法で

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

である。(10)が恒等的に0でない解を持つ為には

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

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

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

により定まる。

(10)の explicit な形を書いてみると

$$
\begin{bmatrix} \phi_{-1} \\ \phi_0 \\ \phi_1 \end{bmatrix}
= \begin{bmatrix}
K\left(G_{\bar{1}0}^{(0)} - G_{\bar{1}\bar{1}}^{(0)}\right) & (-zK+M\omega^2)G_{\bar{1}0}^{(0)} + K\sum_{\Delta'} G_{\bar{1}\Delta'}^{(0)} & K\left(G_{\bar{1}0}^{(0)} - G_{\bar{1}1}^{(0)}\right) \\
K\left(G_{00}^{(0)} - G_{0\bar{1}}^{(0)}\right) & (-zK+M\omega^2)G_{00}^{(0)} + K\sum_{\Delta'} G_{0\Delta'}^{(0)} & K\left(G_{00}^{(0)} - G_{01}^{(0)}\right) \\
K\left(G_{10}^{(0)} - G_{1\bar{1}}^{(0)}\right) & (-zK+M\omega^2)G_{10}^{(0)} + K\sum_{\Delta'} G_{1\Delta'}^{(0)} & K\left(G_{10}^{(0)} - G_{11}^{(0)}\right)
\end{bmatrix}
$$

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

$$
= \begin{bmatrix}
G_{\bar{1}\bar{1}}^{(0)} & G_{\bar{1}0}^{(0)} & G_{\bar{1}1}^{(0)} \\
G_{0\bar{1}}^{(0)} & G_{00}^{(0)} & G_{01}^{(0)} \\
G_{1\bar{1}}^{(0)} & G_{10}^{(0)} & G_{11}^{(0)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
-K & K & 0 \\
K & -zK+M\omega^2 & K \\
0 & K & -K
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \phi_{-1} \\ \phi_0 \\ \phi_1 \end{bmatrix}
= \mathbb{G}\mathbb{V}\boldsymbol{\phi} \tag{6.13}
$$

3次元単純立方格子の場合は

$$
\mathbb{G} = \begin{array}{c|c}
 & \begin{array}{ccccccc} 000 & 100 & \bar{1}00 & 010 & 0\bar{1}0 & 001 & 00\bar{1} \end{array} \\
\begin{array}{c} 000 \\ 100 \\ \bar{1}00 \\ 010 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \\ 00\bar{1} \end{array} &
\begin{bmatrix}
G_{000} & G_{\bar{1}00} & G_{100} & G_{0\bar{1}0} & G_{010} & G_{00\bar{1}} & G_{001} \\
G_{100} & G_{000} & G_{200} & G_{1\bar{1}0} & G_{110} & G_{10\bar{1}} & G_{101} \\
G_{\bar{1}00} & G_{\bar{2}00} & G_{000} & G_{\bar{1}\bar{1}0} & G_{\bar{1}10} & G_{\bar{1}0\bar{1}} & G_{\bar{1}01} \\
G_{010} & G_{\bar{1}10} & G_{110} & G_{000} & G_{020} & G_{01\bar{1}} & G_{011} \\
G_{0\bar{1}0} & G_{\bar{1}\bar{1}0} & G_{1\bar{1}0} & G_{0\bar{2}0} & G_{000} & G_{0\bar{1}\bar{1}} & G_{0\bar{1}1} \\
G_{001} & G_{\bar{1}01} & G_{101} & G_{0\bar{1}1} & G_{011} & G_{000} & G_{002} \\
G_{00\bar{1}} & G_{\bar{1}0\bar{1}} & G_{10\bar{1}} & G_{0\bar{1}\bar{1}} & G_{01\bar{1}} & G_{002} & G_{000}
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$
= \begin{bmatrix}
g_0 & g_1 & g_1 & g_1 & g_1 & g_1 & g_1 \\
g_1 & g_0 & g_2 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} \\
g_1 & g_2 & g_0 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} \\
g_1 & g_{11} & g_{11} & g_0 & g_2 & g_{11} & g_{11} \\
g_1 & g_{11} & g_{11} & g_2 & g_0 & g_{11} & g_{11} \\
g_1 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_0 & g_2 \\
g_1 & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_{11} & g_2 & g_0
\end{bmatrix} \qquad (6.14)
$$

$$
\mathbb{V} = \begin{array}{c} \\ 000 \\ 100 \\ \bar{1}00 \\ 010 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \\ 00\bar{1} \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} 000 & 100 & \bar{1}00 & 010 & 0\bar{1}0 & 001 & 00\bar{1} \end{array} \\
\left[\begin{array}{ccccccc}
-zK+M\omega^2 & K & K & K & K & K & K \\
K & -K & & & & & \\
K & & -K & & & & \\
K & & & -K & & & \\
K & & & & -K & & \\
K & & & & & -K & \\
K & & & & & & -K
\end{array}\right]
\end{array}
\tag{6.15}
$$

ここに

$$g_0 = \frac{1}{\pi^3}\iiint_0^\pi \frac{dk_x\,dk_y\,dk_z}{M\omega^2 - zK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \tag{6.16}$$

$$g_1 = \frac{1}{\pi^3}\iiint_0^\pi \frac{\cos k_x\;dk_x\,dk_y\,dk_z}{M\omega^2 - zK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \tag{6.17}$$

$$g_2 = \frac{1}{\pi^3}\iiint_0^\pi \frac{\cos 2k_x\;dk_x\,dk_y\,dk_z}{M\omega^2 - zK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \tag{6.18}$$

$$g_{11} = \frac{1}{\pi^3}\iiint_0^\pi \frac{\cos k_x \cos k_y\;dk_x\,dk_y\,dk_z}{M\omega^2 - zK(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)} \tag{6.19}$$

である．$\mathbb{G}$，$\mathbb{V}$ は何れも

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

の形をしている。（ 20 ）は

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

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

による unitary 変換 $\mathbb{S}^{-1}\mathbb{A}\,\mathbb{S}$ により block diagonalize 出来る。

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

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

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

に注意すると

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

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

始の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）を（20）に入れて（24）を作ると

$$\det\left\{\begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}-\begin{bmatrix} g_0 & \sqrt{6}g_1 \\ \sqrt{6}g_1 & g_0+g_1+4g_{11} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -zK+M\omega^2 & \sqrt{6}K \\ \sqrt{6}K & -K \end{bmatrix}\right\}=0 \tag{6.26}$$

$$[1+K(g_0-g_2)]^3=0 \tag{6.27}$$

$$[1+K(g_0+g_2-2g_1)]^2=0 \tag{6.28}$$

の三つに 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の Heisenberg 模型[25-29]
但し後者については主として T_N のみ…
る。また反強磁性の場合格子…の…は…
けられるものとし、両 sublattice に対して磁場が同じ向きにかか
った場合と反対の向きにかかった場合 (staggered field) を出来
るだけ平行に扱おう (以下複号下が staggered field の場合)。この系に対する
Hamiltonian は

$$\mathcal{H}=-2J\sum \mathbf{S}_f\cdot\mathbf{S}_m-g\mu He^{i(\frac{\pi}{2}\mp\frac{\pi}{2})f}\sum S_f^z \qquad (17)$$

$$=-\frac{1}{4}zNJ-\frac{1}{2}g\mu HN-\sum_f\sum_m J(f-m)b_f^+b_m$$

$$+(zJ+g\mu He^{i(\frac{\pi}{2}\mp\frac{\pi}{2})f})\sum b_f^+b_f$$

$$\sum_f\sum_m J(f\ \ \ )b_f^+b_f b_m^+ b_m$$

のように書き表わされる。ここに f, m は格子点、b_f^+, b_f … Pauli operator で異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 は交換相互作用でいま最近接格子点間の相互作用のみを考えると

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

（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

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

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

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

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ないが，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

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

とおいて G_{AB} を G_{gf} と書くこととし，（５）を作ると，

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

$$+ \ (zJ + g\mu H e^{i(g-f)(\frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{2})}) G_{gf^+} + 2J \sum G_{g^+, g, g+\Delta; f^+}$$

$$- 2J \sum G_{g+\Delta^+, g+\Delta, g; f^+} \qquad (7.7)$$

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

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

と近似する（Tjablikov 近似）[25]．

先ず強磁性の場合を考える．（８）と

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

とを（7.7）に入れ $\sum_\Delta$ を行うと $G_k(E) = \dfrac{\sigma}{E - E_k}$ が求められる．これより

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

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

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

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

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

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$\sigma=(1-2\bar{n})$倍である．この因子$(1-2\bar{n})$はPauli operatorのFermi的性格にもとづく。

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

$$\langle b_f^+(t')b_g(t)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-iE(t-t')}$$

$$\times \frac{i}{e^{\beta\omega}-1}\left[G_{gf}(E+i\epsilon)-G_{gf}(E-i\epsilon)\right] \qquad (7.15)$$

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

のように求まる ここで$t=t'$, $f=g$とすると

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

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

$$[\text{illegible}]\, g\mu H e^{i(g-f)(\frac{\pi}{2}\mp\frac{\pi}{2})})G_{gf}+\sigma_g J\sum_\Delta G_{g+\Delta,f}=\delta_{gf}\sigma_f \qquad (7.18)$$

こ[illegible]を着目する格子点とし，fの属する sublattice s (sameのs)と[illegible]ない sublattice d (differentのd)に分けてG_{gf}のFourier変換$G_{1\lambda}(E)$，$G_{2\lambda}(E)$を作る。

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

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

(19)(20)のΣは夫々 $g.f$ が同じ sublattice 上にある場合及び異る 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。

$$(E - zJ\sigma_2 - g\mu H)G_{1\lambda} + \sigma_1 Jz\gamma_\lambda G_{2\lambda} = \sigma_1 \tag{7.21}$$

$$(E - zJ\sigma_1 \mp g\mu H)G_{2\lambda} + \sigma_2 Jz\gamma_\lambda G_{1\lambda} = 0 \tag{7.22}$$

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

$$G_{1\lambda} = \frac{\sigma_1}{E_1 - E_2}\left[\frac{E_1 - zJ_{11}\sigma_1 - g\mu H}{E - E_1} - \frac{E_2 - zJ_{11}\sigma_1 - g\mu H}{E - E_2}\right] \tag{7.23}$$

ここに $E_{1,2}$ は ordinary field に対して

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}\left\{zJ(\sigma_1 + \sigma_2) + 2g\mu H \pm \left[z^2J^2(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4\sigma_1\sigma_2(Jz)^2\gamma_\lambda^2\right]^{1/2}\right\} \tag{7.24}$$

staggered field に対して

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}\left\{zJ(\sigma_1 + \sigma_2) \pm \left[z^2J^2(\sigma_1 - \sigma_2)^2 - 4Jzg\mu H(\sigma_1 - \sigma_2) + 4(g\mu H)^2 + 4\sigma_1\sigma_2(Jz)^2\gamma_\lambda^2\right]^{1/2}\right\} \tag{7.25}$$

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

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

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

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

ここに

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

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

$$F = \frac{zJ_{11}(\sigma_1 - \sigma_2)}{\left[z^2 J_{11}^2(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4J_\perp^2 \sigma_1\sigma_2 z^2 \gamma_\lambda^2\right]^{1/2}} \tag{7.30}$$

同様に他の sublattice の部分磁化は

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

(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できる。(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

$$A = \beta(g\mu H + zJ_{11}\sigma) \tag{7.32}$$

$$B = \beta z J\sigma\gamma_\lambda \tag{7.33}$$

$$F = 0 \tag{7.34}$$

で

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

第1項、第2項は等しい値を与えるから

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{2}{N}\sum_{\lambda}^{N/2}\coth\frac{\beta}{2}\left[g\mu H + zJ_{11}\sigma(1-\gamma_\lambda)\right] \tag{7.36}$$

これは反強磁性体のパラ領域におけるσとHの関係を与える式で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 $\bar{\chi} \equiv 2\sigma / g\mu H$ (nomalized susceptibility) 一定として $\sigma \to 0$, $H \to 0$ の極限をとると $\coth x$ の展開の第1項のみとってよいから（17），（36）より

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N}\sum_{k}^{N} \frac{2}{\beta E_k} \tag{8.1}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{k}^{N} \frac{1}{\beta} \frac{1}{g\mu H + J\sigma z(1-\gamma_k)} \tag{8.2}$$

すなわち

$$J\beta = \frac{1}{N}\sum_{k}^{N} \frac{1}{\frac{g\mu H}{2J\sigma} + \frac{z}{2}(1-\gamma_k)} \tag{8.3}$$

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

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

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

で与えられる.即ち

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

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

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

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(Katsura, Matsubara[29]). $I_{sc}(|S|>3)$, $I_{bcc}(|S|>1)$; $I_{fcc}(S>3)$ に対しては Mannari Kawabata[18] 又は Morita Horiguchi[12] の表により, $I_{fcc}(S<-1)$ に対しては(反強磁性の場合必要) Morita Horiguchi[12] の表により数値が与えられてある. sc と bcc に対しては $T_c = T_N$, $\bar{\chi}_{AF}(T_N) = 1/z|J|$ 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.

$\sigma_1 = -\sigma_2$ として (7.25) より

$$E_{1,2} = \pm\left\{ z^2 J^2 \sigma_1^2 - 2Jzg\mu H\sigma_1 + (g\mu H)^2 - \sigma_1^2 (Jz)^2 \gamma_\lambda^2 \right\}^{1/2} \quad (8.7)$$

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

$$\langle b_f^+ b_f \rangle = \bar{n} = \frac{1-\sigma_1}{2}$$

$$= \frac{2}{N}\sum^{N/2} \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dE\,\sigma_1 \frac{E - zJ\sigma_1 + g\mu H}{E_1 - E_2} \frac{1}{e^{\beta E}-1}\left(\delta(E-E_1) - \delta(E-E_2)\right) \quad (8.8)$$

これより

$$\frac{1}{\sigma_1} = \frac{2}{N}\sum \frac{1}{2}\left(\frac{E_1}{E_1-E_2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta E_1}{2} - \frac{E_2}{E_1-E_2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta E_2}{2} \right)$$

$$+ \frac{1}{2}\,\frac{g\mu H - zJ\sigma_1}{E_1 - E_2}\left(\mathrm{cth}\,\frac{\beta E_1}{2} - \mathrm{cth}\,\frac{\beta E_2}{2} \right) \quad (8.9)$$

$H \to 0$, $\sigma \to 0$ とする。 $E = 0(\sigma)$ であるから $0(E)$ までとると

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

$$= \frac{2}{N}\sum^{N/2} \frac{2(-g\mu H + zJ\sigma_1)}{\beta E_1 E_2} \quad (8.11)$$

故に

$$-J\beta = \frac{2}{N}\sum^{N/2} \frac{2\left(1-\dfrac{g\mu H}{zJ\sigma}\right)}{\left(1-\dfrac{g\mu H}{zJ\sigma}\right)^2-\gamma_\lambda^2} \tag{8.12}$$

$$= \frac{2}{N}\sum^{N/2} \frac{2}{1-\dfrac{g\mu H}{zJ\sigma}-\gamma_\lambda} \tag{8.13}$$

$$J\beta = G(\ 1/J\,\overline{\chi}_s) \tag{8.14}$$

ここに $\overline{\chi}_s$ は nomalized staggered susceptibility

$$\overline{\chi}_s \equiv \lim_{H\to 0}\frac{2\sigma}{g\mu H} \tag{8.15}$$

(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 $\overline{\chi}_s$ は発散する。（これは sc，bcc 等のことで 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が出来る。磁場が存在すれば勿論この２つは異るので ordinary case では critical field が存在するが staggered case では critical field が存在しない。

要するに staggered antiferromagnet というものは一つの sublattice だけ見れば殆んど 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[30]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。

Mubayi, Lange[31], Oguchi[32], Shimizu[33] はある近似において二次元強磁性 Heisenberg において Stanley・Kaplan 型 phase change を導いた（$T \to T_c$ で $\chi \to \infty$, $T < T_c$ 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２次元では Stanley・Kaplan 型 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でのべたように orthorhombic latticeの一体Green関数は simple cubic lattice の2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 $S=\frac{1}{2}$ のスピン系の Hamiltonian を

$$H = -J\sum_{ij} S_i S_j + NzJS^2$$

$$= -J\sum_{j}\sum_{\Delta}^{6}\left\{S_j^z S_{j+\Delta}^z + S_j^+ S_{j+\Delta}^-\right\} + NzJS^2 \qquad (9.1)$$

とする。$\underset{\sim}{J}^2$ ($\underset{\sim}{J} = \sum \underset{\sim}{S}_j$) と J^z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

$$n = NS + \sum S_i^z \qquad (9.2)$$

は Hamiltonian と可換である。

状態$|0>$をもって

$$S_j^- |0> = 0 \qquad (9.3)$$

であるような全体の向きのそろった normalize された状態とする。 $|0>$ 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

$$H|0> = 0 \qquad (9.4)$$

ならしめるよう付加えておいたのである。

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

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

$[H, S_j^+]$ を作ると

$$[H, S_j^+] = 2J\sum_\Delta^6 (S_{j+\Delta}^+ S_j^z - S_j^+ S_{j+\Delta}^z) \qquad (9.6)$$

故に

$$H|j> = [H, S_j^+]|0> + S_j^+ H|0>$$

$$= [H, S_j^+]|0> \qquad (9.7)$$

（6）を入れて

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

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

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

で

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

従って

$$H|\lambda\rangle = N^{-\frac{1}{2}} J \sum_j \sum_\Delta \exp(i\lambda_j)[|j\rangle - |j+\Delta\rangle]$$

$$= J[z - \sum_\Delta^6 \cos(\lambda\Delta)]|\lambda\rangle \qquad (9.10)$$

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

$$E_\lambda = J[z - \sum_\Delta^6 \cos(\lambda\Delta)] \qquad (9.11)$$

である。

$n=2$ の normalized eigenstate を

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

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

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 を

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

とする。

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

状態 $|jk\rangle$ に対してHを作用~~させ~~ると

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

$$= [HS_j^+, S_k^+]|0\rangle + S_k^+ HS_j^+|0\rangle$$

$$= [[H, S_j^+], S_k^+]|0\rangle + [S_j^+ H, S_k^+]|0\rangle$$

$$+ S_k^+[H, S_j^+]|0\rangle + S_k^+ S_j^+ H|0\rangle \qquad (9.14)$$

（14）の右辺第2項は

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

である．（15）を考慮して

$$H|jk\rangle = S_k^+[H, S_j^+]|0\rangle + S_j^+[H, S_k^+]|0\rangle + [[H, S_j^+], S_k^+]|0\rangle \qquad (9.16)$$

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

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

$$= 2J\sum_\Delta \{\delta_{jk} S_{j+\Delta}^+ [S_j^z, S_j^+] - \delta_{j+\Delta,k} S_j^+ [S_{j+\Delta}^z, S_{j+\Delta}^+]\}$$

$$= 2J\sum_\Delta (\delta_{jk} - \delta_{j+\Delta,k}) S_j^+ S_{j+\Delta}^+ \qquad (9.17)$$

$$\Psi = \sum_{i,j} U(i,j)|ij\rangle \qquad (9.18)$$

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 $H\Psi = E\Psi$ より

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

{ }内第1項，第2項に対しては(7)(9)を用い

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

(20)の{ }内第3項を変形する.

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

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

$\sum_k$ を行って

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

(21)を(20)に入れる. $E/J=\omega$ とおくと

$$\sum_{ij}\Big\{U(i,j)(2z-\omega) - \sum_\Delta U(i,j-\Delta) - \sum_\Delta U(i-\Delta,j) + U(i,i)\,2\sum_\Delta\delta_{i+\Delta,j} - \sum_\Delta U(i,i+\Delta)\,2\delta_{i+\Delta,j}\Big\}S_i^+S_j^+|0\rangle = 0 \qquad (9.22)$$

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

$$U(i,j)(\omega-2z)+\sum_{\Delta}^{6}[U(i,j-\Delta)+U(i-\Delta,j)]$$

$$=U(i,i)\,2\sum_{\Delta}^{6}\delta_{i+\Delta,j}-\sum_{\Delta}^{6}U(i,i+\Delta)\,2\,\delta_{i+\Delta,j} \qquad (9.23)$$

が得られる。

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

$$(\omega-2z)U(i,j)+\sum_{\Delta}^{6}[U(i,j+\Delta)+U(i+\Delta,j)]$$

$$=\delta_{i+\Delta,j}[U(i,i)+U(j,j)-2U(i,j)]. \qquad (9.24)$$

(24) において $\delta_{i+\Delta,j}$ は i と j がとなり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 $U(i,i)$ 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 $U(i,i)$ が定まると考えても物理的に意味のある $U(i,j)$ 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 $U(i,j)$ を求めよう.

重心座標と相対座標

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

を用い変換

$$U(i,j) = \frac{1}{N}\sum_{K} e^{iK\cdot R} u_K(r) \tag{9.26}$$

を(24)にいれると

$$(\omega-2z)u_K(r) + 2\sum_{\Delta}^{3}\cos\frac{K\Delta}{2}[u_K(r-\Delta)+u_K(r+\Delta)]$$

$$= 2\sum_{\Delta}^{6}\delta_{r,\Delta}\left[\cos\frac{Kr}{2}u_K(0)-u_K(r)\right] \tag{9.27}$$

ここで $\delta_{r,\Delta}$ は Kronecker の δ で r が6つの nearest neighbor vector の1つのとき1，それ以外は0である．

次に

$$u_K(r) = \frac{1}{N}\sum_{k} e^{ikr} F_K(k) \tag{9.28}$$

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

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

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

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

(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．

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

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

$$\left(\cos\frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta\right) F_K(k) = \frac{4\sum_{\Delta}^{3}\cos k\Delta'\left(\cos\frac{K\Delta}{2} - \cos k\Delta\right) U_K^{\Delta'}}{\omega - \epsilon_K(k)} \tag{9.33}$$

両辺を $\frac{1}{N}\sum_k$ で総和して

$$U_K^{\Delta} = \sum_{\Delta}^{3} B_K(\Delta, \Delta') U_K^{\Delta'} \tag{9.34}$$

ここで

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

同次一次方程式（34）が解をもつ為には

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

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 有限のときの（36）の零点は，energy level を与えるが $N \to \infty$ で連続スペクトル及び離散スペクトルになる．$N \to \infty$ のときの孤立した零点が bound state enegy 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

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

$$\alpha_l = \cos\frac{1}{2}K_l \qquad l = x, y, z \tag{9.37}$$

とすると

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

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

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

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

(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)(及びこれに相当する　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ことにより $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha$ の場合及び $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, $\alpha_3 = 0$ の場合のbound stateがWortis[36]により

求められている。これより α − 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 $\alpha_\ell = 1$ 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 の大さの差に、force constant の差が exchange energy の差に、不純物付近の振幅の分布が磁化の分布に対応する。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

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

を

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

でおきかえ

$$G_r(E) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{e^{ikr}}{E-E_k} \tag{10.3}$$

を

$$G_r(E) = 2\langle S^z\rangle \frac{1}{N}\sum_k \frac{e^{ikr}}{E-E_k} \tag{10.4}$$

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攝動 H_1 をうける問題を考える．無攝動系 H_0 の固有関数を $u_{n,k}(r)$ とする． n はこの Bloch 関数が属する band を示し，k は

$$u_{n,k}(r + R_l) = e^{ik \cdot R_l}\, u_{n,k}(r) \qquad (11.1)$$

となるような propagation vector である。この Bloch 関数の energy を $E_n(k)$ とする

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

この Bloch 関数から与えられた band の Wannier 関数 $a_n(r - R_l)$ を作る。

$$a_n(r - R_l) \equiv N^{-1/2} \sum_k u_{n,k}(r)\, e^{-ik \cdot R_l} \qquad (11.3)$$

（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。

$$\int a_n^*(r - R_l)\, a_{n'}(r - R_{l'})\, dr$$
$$= \frac{1}{N} \sum_{kk'} e^{i(kR_l - k'R_{l'})} \int u_{n,k}^*(r)\, u_{n',k'}(r)\, dr$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{kk'} e^{i(kR_l - k'R_{l'})}\,\delta_{k,k'}\,\delta_{nn'}$$

$$= \delta_{ll'}\,\delta_{nn'} \tag{11.4}$$

Wannier 関数にH_0を operate すると

$$H_0 a_n(r - R_l) = N^{-1/2}\sum_k e^{-k\cdot R_l}\, H_0 u_{n,k}(r)$$

$$= N^{-1/2}\sum_k e^{-ik\cdot R_l}\, E_n(k)\, u_{n\cdot k}(r)$$

$$= \frac{1}{N}\sum_k e^{-ik\cdot R_l}\, E_n(k)\sum_{l'} e^{ik\cdot R_{l'}}\, a_n(r - R_{l'}) \tag{11.5}$$

ここで

$$\int a_n^*(r)\, H_0\, a_n(r - R_i)\,dr = \mathcal{E}_n(R_i) \tag{11.6}$$

により$\mathcal{E}_n(R_i)$を定義する。

$$(6)\text{の左辺} = \frac{1}{N}\sum\sum\int u_{n\cdot k}^*(r)\, H_0\, u_{n\cdot k'}(r)\, e^{-ik\cdot R_i}\,dr$$

$$= \frac{1}{N}\sum\sum e^{-ik\cdot R_i}\, E_n(k')\,\delta_{k\cdot k'}$$

であるから

$$\mathcal{E}_n(R_j) = \frac{1}{N}\sum_k E_n(k)\, e^{-ik\cdot R_j} \tag{11.7}$$

$$E_n(k) = \sum_j \mathcal{E}_n(R_j)\, e^{+ik\cdot R_j} \tag{11.8}$$

である，（7）を（5）に入れると

$$H_0 a_n(r - R_l) = \sum_{jl} \delta_{R_{l'} - R_l + R_j} \; \mathcal{E}_n(R_j) a_n(r - R_{l'})$$
$$= \sum_{l} \mathcal{E}_n(R_l - R_{l'}) a_n(r - R_{l'}) \qquad (11.9)$$

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。

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

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

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

$$\sum_n \sum_j U_m(R_i) \mathcal{E}_m(R_j - R_i) \delta_{nm} + \sum_n \sum_j U_n(R_i) V_{nm}(R_i, R_j)$$
$$= \sum_n \sum_j E U_n(R_i) \delta_{nm} \qquad (11.12)$$

故に

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

（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 $U_m(R_j) = e^{ik \cdot R_j}$ 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と

$$\mathcal{E}(0) = \int a^*(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{R}_i) H_0 \, a(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{R}_i) \, dr \tag{11.14}$$

$$\mathcal{E}(1) = \int a^*(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{R}_i) H_0 \, a(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{R}_{i+\Delta}) \, d\underset{\sim}{r} \tag{11.15}$$

$$V(0) = \int a^*(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{R}_i) V(\underset{\sim}{r}) a(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{R}_i) \, d\underset{\sim}{r} \tag{11.16}$$

$$\mathcal{E}(R_i) = 0 \qquad R_i \neq 0, \Delta, \tag{11.17}$$

$$V(R_i) = 0 \qquad R_i \neq 0 \tag{11.18}$$

となりこのとき（13）は

$$(\mathcal{E}(0) - E) U(R_i) + \mathcal{E}(1) \sum_{\Delta}^{6} U(R_i + \Delta) = 0 \tag{11.19}$$
$$R_i \neq (0, 0, 0)$$

$$(\mathcal{E}(1) + V(0) - E) U(0) + \mathcal{E}(1) \sum_{\Delta}^{6} U(\Delta) = 0 \tag{11.20}$$

$$E = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1)[\cos kx + \cos ky + \cos kz] \tag{11.21}$$

となる．即ち $U(R)$ は§2 でのべた格子Green関数である。Koster-Slater[44]は（(9)－(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．この他にも格子Green関数の現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．こ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 Koster[44]の無限積分

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

$$I_{sc}(a<3\,;\,l,m,n)$$

$$=i^{\,l+m+n+1}\int_0^\infty dt\,e^{-iat}\,J_l(t)\,J_m(t)\,J_n(t) \tag{12.2}$$

で彼等はSimpsonの方法によりこの数値積分を行った。

またTickson[45]は

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

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

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

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

である。

Mannari Kawabata[18]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）およびfccに対する同様の式にもとずいて $I_{sc}(a>3)$, $I_{fcc}(a>3)$, $I_{bcc}(a>1)$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

$$a_0 = a \quad , \quad b_0 = b \tag{12.5}$$

$$a_n = \frac{a_{n-1} + b_{n-1}}{2} \tag{12.6}$$

$$b_n = \sqrt{a_{n-1} \; b_{n-1}} \tag{12.7}$$

とすると

$$\lim a_n = \lim b_n = M(a, b) \tag{12.8}$$

を a, b の算術幾何平均という。これに対し

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

$$k^2 = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}} \tag{12.10}$$

が証明されている。（kは複素数値でよい 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 関数があらわれるか，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みられたい。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。（研究会の際は解析接続による考え方の例として bcc についてのべたがこれは 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 approximation, 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.