

Orthorhombic Lattice Green's Functions

東北大, I

山崎 義 武

(序) 我々は次の Lattice Green's Function (LGF)

$$G(t; \{\gamma_i\}, \{\gamma_{12}\}, \{\gamma_{123}\}; l, m, n) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \int_0^\pi dz \cos lx \cos my \cos nz / (t - \omega) \quad (1)$$

を考える。ここで,

$$\omega \equiv \gamma_1 \cos x + \gamma_2 \cos y + \gamma_3 \cos z + \gamma_{12} \cos x \cos y + \gamma_{23} \cos y \cos z + \gamma_{31} \cos z \cos x + \gamma_{123} \cos x \cos y \cos z \quad (2)$$

t ; energy, (l, m, n) ; reference lattice point (RLP) を表わす整数の set $\{\gamma_i\}$ の set は

3次元 中

$$\{\gamma_i\} \equiv (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \quad \{\gamma_{12}\} \equiv (\gamma_{12}, \gamma_{23}, \gamma_{31}) \quad \{\gamma_{123}\} \equiv (\gamma_{123})$$

単独 ; SO の 1st n.n. int. FCO の 1st n.n. int. BCO の 1st n.n. int.

or 重心系の momentum

単独でなし; SO の 1st n.n. int. SO の 2nd n.n. int. SO の 3rd n.n. int.

(註)

SO: Simple Orthorhombic Lattice, FCO; Face Centered Orthorhombic Lattice,
BCO; Body Centered Orthorhombic Lattice, R; Rectangular Lattice, CR; Centered R.

2次元 で

$$\{\gamma_i\} \equiv (\gamma_2, \gamma_3) \quad \{\gamma_{12}\} \equiv (\gamma_{23}) \quad \{\gamma_{123}\} \equiv (0)$$

単独 ; R の 1st n.n. int. or CR の 1st n.n. int.
重心系の momentum

単独でない; R の 1st n.n. int. R の 2nd n.n. int.

を表わす parameters である。

既に, SO で 1st n.n. int. のみをもつ系の原点での LGF は¹⁾で、又、任意の R LP での LGF は²⁾にまとめられている。FCO で 1st n.n. int. のみをもつ系の原点³⁾を含め任意の RLP⁴⁾での LGF がまとめられ、SO で 2nd n.n. と 3rd n.n. int. まで含め任意の RLP での LGF は⁵⁾⁶⁾にまとめられている。この中には special case として BCO で 1st n.n. int. のみをもつ系の LGF が含まれている。

こゝで用いられた方法は, energy を complex number に考えると LGF は 2次元と3次元格子で、それぞれ, complex modulus k をもつ完全積層積分とそれ自身を含む1重の積分を表わすことが出来, complex k plane でのそれらの解析性により LGF の real と imaginary part が得られる。^{1) 3) 5)} 原点での LGF は第1種のみで、それを除く RLP では第1, 2, 3種の完全積層積分と簡単な定積分により求められている。1), 3) は $k > 1$, $k < -1$, $-1 < k < 1$, $k_I > 0$, $k_I < 0$ ($k = ik_I$, k_I : real) の場合に属する3次元積分の最後の積分変数 x と energy の関係を analytic に求めずから数値計

算を行っているのに対し, 4), 5), 6) は相互作用を表わす parameters が多く対応する x と energy の関係が複雑化しすぎるためその過程も数値計算させている。

個々の場合に対する詳細な formulation と数値結果については対応する文献にゆずって, 以下では (1), (2) 式で表わされる RLP での LGF を求める方法を概観するにとどめる。^{4) 5) 6)}

(本論) (1) 式を変数 x と z について積分すると変数 x を含む項が parameter として残っているので

$$G_2(\tilde{t}; \tilde{\gamma}_{12}, \tilde{\gamma}_{23}, \tilde{\gamma}_{31}; m, n) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi d\gamma \int_0^\pi dz \cos m\gamma \cos nZ / (\tilde{t} - \tilde{\gamma}_{12} \cos \gamma - \tilde{\gamma}_{23} \cos \gamma \cos Z - \tilde{\gamma}_{31} \cos Z) \quad (3)$$

を導入する。こゝに,

$$G(t; \{\gamma_i\}, \{z_i\}; l, m, n) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dx \cos lx G_2(\tilde{t}; \tilde{\gamma}_{12}, \tilde{\gamma}_{23}, \tilde{\gamma}_{31}; m, n) \quad (1')$$

$$\tilde{t} \equiv t - \gamma_1 \cos x \equiv \tilde{s} - i\epsilon \quad (\epsilon \geq 0), \quad t \equiv s - i\epsilon \quad (4)$$

$$\tilde{\gamma}_{12} \equiv \gamma_{12} \cos x + \gamma_2, \quad \tilde{\gamma}_{23} \equiv \gamma_{23}, \quad \tilde{\gamma}_{31} \equiv \gamma_{31} \cos x + \gamma_3.$$

(3) 式は Helmholtz 方程式の Green's Function

$$\begin{aligned} & 2\tilde{t} G_2(\tilde{t}; m, n) - \tilde{\gamma}_{12} \{G_2(\tilde{t}; m+1, n) + G_2(\tilde{t}; m-1, n)\} \\ & - \frac{\tilde{\gamma}_{23}}{2} \{G_2(\tilde{t}; m+1, n+1) + G_2(\tilde{t}; m+1, n-1) + G_2(\tilde{t}; m-1, n+1) + G_2(\tilde{t}; m-1, n-1)\} \\ & - \tilde{\gamma}_{31} \{G_2(\tilde{t}; m, n+1) + G_2(\tilde{t}; m, n-1)\} = 2\delta_{m,0} \delta_{n,0} \end{aligned} \quad (5)$$

で定義され, 次の対称性

$$\begin{aligned} G_2(-m) &= G_2(m), \quad G_2(\tilde{t}; -\tilde{\gamma}_{12}) = -(-1)^m G_2(\tilde{t}; \tilde{\gamma}_{12})^*, \quad G_2(\tilde{t}; -\tilde{\gamma}_{31}) = -(-1)^m G_2(\tilde{t}; \tilde{\gamma}_{31})^*, \\ G_2(\tilde{t}; -\tilde{\gamma}_{23}) &= -(-1)^{m+n} G_2(\tilde{t}; \tilde{\gamma}_{23})^*, \quad G_2(-\tilde{\gamma}_{12}; -\tilde{\gamma}_{31}) = (-1)^{m+n} G_2(\tilde{\gamma}_{12}; \tilde{\gamma}_{31}), \end{aligned}$$

$$G_2(-\tilde{\gamma}_{12}; \tilde{\gamma}_{23}) = (-1)^m G_2(\tilde{\gamma}_{12}; \tilde{\gamma}_{23}), \quad G_2(-\tilde{\gamma}_{23}; -\tilde{\gamma}_{31}) = (-1)^m G_2(\tilde{\gamma}_{23}; \tilde{\gamma}_{31}),$$

$$G_2(\tilde{t}; -\tilde{\gamma}_{12}, -\tilde{\gamma}_{23}, -\tilde{\gamma}_{31}) = -G_2(-\tilde{t}; \tilde{\gamma}_{12}, \tilde{\gamma}_{23}, \tilde{\gamma}_{31})^* \quad (6)$$

を繰り返すので

$$m \geq 0, n \geq 0, \tilde{\gamma}_{12} \geq 0, \tilde{\gamma}_{23} \geq 0, \tilde{\gamma}_{31} \geq 0 \quad (7)$$

の場合を考える。

$n=0$ のとき (3) は

$$G_2(\tilde{t}; m+2, 0) = \frac{1}{\tilde{\gamma}_{12}^2 - \tilde{\gamma}_{23}^2} \left\{ 2(\tilde{t} \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31} \tilde{\gamma}_{12}) \left[\frac{2m+1}{m+1} G_2(\tilde{t}; m+1, 0) + \frac{2m-1}{m+1} G_2(\tilde{t}; m-1, 0) \right] \right. \\ \left. - \frac{2m}{m+1} (2\tilde{t}^2 - 2\tilde{\gamma}_{31}^2 + \tilde{\gamma}_{12}^2 - \tilde{\gamma}_{23}^2) G_2(\tilde{t}; m, 0) - \frac{m-1}{m+1} G_2(\tilde{t}; m-2, 0) \right\} \quad (8)$$

の recurrence formula を繰り返す。 $G_2(\tilde{t}; 0, 0), G_2(\tilde{t}; 1, 0), G_2(\tilde{t}; 2, 0)$ の3つの LGF が分れば $\tilde{\gamma}$ 軸上のすべての LGF が得られる。

$$\tilde{\gamma}_{12} \geq \tilde{\gamma}_{23} \quad \text{or} \quad \tilde{\gamma}_{23} > \tilde{\gamma}_{12} \quad \text{for} \quad \tilde{t} > \tilde{\gamma}_{12} + \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31} \quad (9)$$

のとき

$$G_2(\tilde{t}; 0, 0) = \frac{4}{\pi \sqrt{(\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{23})^2 - (\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{31})^2}} K(k)$$

$$G_2(\tilde{t}; 1, 0) = \frac{4}{\pi \sqrt{(\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{23})^2 - (\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{31})^2}} \left[\frac{\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{31}}{\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{23}} K(k) - \frac{\tilde{t} - \tilde{\gamma}_{12} + \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31}}{\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{23}} \Pi(\alpha^2, k) \right]$$

$$G_2(\tilde{t}; 2, 0) = \frac{2}{\pi \sqrt{(\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{23})^2 - (\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{31})^2}} \frac{1}{(\tilde{\gamma}_{23} - \tilde{\gamma}_{12})^2} \left[\left\{ 2(\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{31})^2 + \frac{(\tilde{t} - \tilde{\gamma}_{12} + \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31})^2}{\alpha^2 - 1} \right\} K(k) \right. \\ \left. - \frac{(\tilde{t} - \tilde{\gamma}_{12} + \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31})^2}{(\alpha^2 - 1)(1 - \frac{k^2}{\alpha^2})} E(k) - (\tilde{t} - \tilde{\gamma}_{12} + \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31}) \left\{ 2(\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{31}) - \frac{\alpha^4 - (1+k^2)\alpha^2 + 3k^2}{(\alpha^2 - 1)(\alpha^2 - k^2)} \right\} \Pi(\alpha^2, k) \right] \quad (10)$$

ここで,

$$k = 2 \sqrt{\frac{\tilde{\gamma}_{23} \tilde{t} + \tilde{\gamma}_{12} \tilde{\gamma}_{31}}{(\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{23})^2 - (\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{31})^2}}, \quad \alpha^2 = \frac{2(\tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{23})}{\tilde{t} + \tilde{\gamma}_{12} - \tilde{\gamma}_{23} + \tilde{\gamma}_{31}} \quad (11)$$

条件 (9) が満たされないときは complex number \tilde{t} に対し, complex modulus k に対する $K(k), E(k), \Pi(\alpha^2, k)$ [Appendix 参照] を用いる。

(10) 別の LGF が計算出来る。

$\tilde{\gamma}_{12}$ と $\tilde{\gamma}_{31}$ の対称性から $\tilde{\gamma}_{12} \leq \tilde{\gamma}_{31}$ の場合を考える。このとき次の 5 つの場合

$$[-1 < k < 1]$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \infty$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{31} < \tilde{\gamma}_{23} \quad \text{and} \quad \begin{cases} -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) \\ -\frac{\tilde{\gamma}_{31} \tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) \end{cases}$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31} \quad \text{and} \quad -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$$

$$\bullet 0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12} \quad \text{and} \quad -\frac{\tilde{\gamma}_{31} \tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$$

$$[1 < k]$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{31} < \tilde{\gamma}_{23} \quad \text{and} \quad \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$$

$$\bullet 0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31} \quad \text{and} \quad -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$$

$$[k < -1]$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31} \quad \text{and} \quad \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\frac{\tilde{\gamma}_{31} \tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}}$$

$$\bullet 0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12} \quad \text{and} \quad \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$$

$$[0 < k_I]$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{31} < \tilde{\gamma}_{23} \quad \text{and} \quad -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\frac{\tilde{\gamma}_{31} \tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}}$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31} \quad \text{and} \quad -\frac{\tilde{\gamma}_{31} \tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$$

$$\bullet 0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12} \quad \text{and} \quad -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$$

$$[k_I < 0]$$

$$\bullet \tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} \quad \text{and} \quad -\infty < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$$

$$\cdot \quad 0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12} \quad \text{and} \quad -\infty < \tilde{s} < -\frac{\tilde{\gamma}_{21} \tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} \quad (12)$$

に分け, 対応する解析接続された $K(k), E(k), \Pi(\alpha^3, k)$ の丸を用いて (10) 丸の計算を行う。

2次元格子 の場合には (10) と (8) 丸から γ 軸上の, 3次元格子 の場合には (10), (8) と (11) 丸から x - γ 面上の, 任意の RLP での LGF が得られる。

これらの LGF が分ると 2次元格子 の場合には 最近接の γ 軸に平行な線上の, 又, 3次元格子 の場合には 最近接の x - γ 面に平行な面上の, 任意の RLP での LGF が, それぞれ,

$$\begin{aligned} & \tilde{\gamma}_{23} \{G_2(\tilde{E}; m+1, 1) + G_2(\tilde{E}; m-1, 1)\} + 2\tilde{\gamma}_{31} G_2(\tilde{E}; m, 1) \\ & = 2\tilde{E} G_2(\tilde{E}; m, 0) - \tilde{\gamma}_{12} \{G_2(\tilde{E}; m+1, 0) + G_2(\tilde{E}; m-1, 0)\} - 2\delta_{m,0} \end{aligned} \quad (13)$$

と (13), (11) 丸から求められる。

これらの LGF が分ると 2次元格子 の場合には γ 軸に平行な $n+1$ 番目の線上の, 又, 3次元格子 の場合には x - γ 面に平行な $n+1$ 番目の面上の, 任意の RLP の LGF が, それぞれ,

$$\begin{aligned} & \frac{\tilde{\gamma}_{23}}{2} \{G_2(\tilde{E}; m+n+1, n+1) + G_2(\tilde{E}; m-1, n+1)\} + \tilde{\gamma}_{31} G_2(\tilde{E}; m, n+1) \\ & = 2\tilde{E} G_2(\tilde{E}; m, n) - \tilde{\gamma}_{12} \{G_2(\tilde{E}; m+1, n) + G_2(\tilde{E}; m-1, n)\} \\ & \quad - \frac{\tilde{\gamma}_{23}}{2} \{G_2(\tilde{E}; m+1, n-1) + G_2(\tilde{E}; m-1, n-1)\} - \tilde{\gamma}_{31} G_2(\tilde{E}; m, n-1) \end{aligned} \quad (14)$$

と (14), (11) 丸による順次得られる。即ち, 2次元格子, 3次元格子に対して任意の RLP での LGF が得られたことになる。

$\{\gamma_1\}, \{\gamma_{12}\}, \{\gamma_{123}\}$ の選定方によつて SO (1st n.n. int., 2nd n.n. int., 3rd n.n. int.), FCO (1st n.n. int.), BCO (1st n.n. int.), R (1st n.n. int., 2nd n.n. int.), CR (1st n.n. int.) に対する Lattice Green's Functions 及び任意の Reference Lattice Point で計算できる。電子計算機を用いて得られた結果は頁数の関係で別の文献で報告する。

[Appendix]

[I] $k > 1$

$$K(k) = \frac{1}{k} \left[K\left(\frac{1}{k}\right) + i K\left(\frac{\sqrt{k^2-1}}{k}\right) \right]$$

$$E(k) = k \left[E(k^{-1}) - (1-k^2)K(k^{-1}) \right] + i k \left[E(\sqrt{1-k^2}) - k^2 K(\sqrt{1-k^2}) \right]$$

$$\Pi(\alpha^2, k) = k^{-1} \Pi(\alpha^2 k^2, k^{-1}) + i k^{-1} \left[K(\sqrt{1-k^2}) + \frac{\alpha^2}{k^2 - \alpha^2} \Pi\left(\frac{k^2-1}{k^2-\alpha^2}, \sqrt{1-k^2}\right) \right]$$

[II] $k < -1$

[I] の $K(k), E(k), \Pi(\alpha^2, k)$ の k での complex conjugate が k^*

[III] $k_I > 0$

$$K(ik_I) = (1+k_I^2)^{-1/2} K((1+k_I^2)^{1/2})$$

$$E(ik_I) = (1+k_I^2)^{1/2} E((1+k_I^2)^{-1/2})$$

$$\Pi(\alpha^2, ik_I) = (1+k_I^2)^{-1/2} \left[\frac{k_I^2}{\alpha^2+k_I^2} K\left(\frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \frac{\alpha^2}{\alpha^2+k_I^2} \Pi\left(\frac{\alpha^2+k_I^2}{1+k_I^2}, \frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) \right]$$

[IV] $k_I < 0$

$$K(ik_I) = -\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + 2i \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)$$

$$E(ik_I) = 3\sqrt{1+k_I^2} E\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) - \frac{4}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) \\ + 2i \left[\sqrt{1+k_I^2} E\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) - \sqrt{1+k_I^2} K\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) \right]$$

$$\Pi(\alpha^2, ik_I) = \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}} \left[\frac{k_I^2 \alpha^2 + k_I^2 + 2\alpha^2}{(\alpha^2 + k_I^2)(\alpha^2 - 1)} K\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \frac{2}{1-\alpha^2} \Pi\left(\frac{\alpha^2 - 1}{\alpha^2(1+k_I^2)}, \frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) \right] \\ + 2i \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}} \left[K\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} \Pi\left(\frac{1}{1-\alpha^2}, \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) \right]$$

[V] $k = k_R - i\epsilon$, $\epsilon \geq 0$ $|k_R| < 1$

$$K(k) = K(k_R) + 2i K(\sqrt{1-k_R})$$

[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

• 山崎 塚 R, 守田

Orthorhombic Lattice に対する Lattice Green's Function

京大. 数理解析研, 講究録 115 (1971.4)

3)

Lattice Green's Function For The Face Centered Orthorhombic Lattice In Terms Of
The Complete Elliptic Integral - At The Origin - , in preparation

4)

Useful Procedure For Computing The Lattice Green's Function
- Centered Rectangular and Face Centered Orthorhombic Lattice - , in preparation.

5)

Lattice Green's Function For The Orthorhombic Lattice With Up To The 2nd n.n.
Interaction , in preparation

6)

Lattice Green's Function For The Orthorhombic Lattice With Up To The 2nd n.n.
Interaction , in preparation