数理解析研究所講究録
第 130 巻 1971 年 235-243

Spin-Wave Green's Functions for a Body-Centered Tetragonal Antiferromagnet *)

神戸大 理　　利根川 孝

§1. 反強磁性体スピン波グリーン関数の定義.

ハイゼンベルグ型反強磁性体におけるスピン波の不純物状態(局在状態及び共鳴状態)、励起子とスピン波の同時励起による光の吸収等の問題を議論する際に必要となるスピン波グリーン関数を、MnF_2 型の結晶の場合について述べる.

MnF_2 型の反強磁性体に対するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J_1\sum_j\sum_\sigma \boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{S}_{j+\sigma} - J_1\sum_l\sum_\sigma \boldsymbol{S}_l\cdot\boldsymbol{S}_{l+\sigma} + 2J_2\sum_j\sum_\rho \boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{S}_{j+\rho}$$
$$-D\sum_j(S_j^z)^2 - D\sum_l(S_l^z)^2, \qquad (J_1, J_2, D>0). \tag{1}$$

ここで j 及び l についての和はそれぞれ上向き及び下向きスピンから成る副格子に属する格子点についての和を意味する。又 J_1, J_2 はそれぞれ副格子内及び副格子間最近接スピンの間

*) T. Tonegawa, Prog. Theor. Phys. 40 (1968) 1195 ; 41 (1969) 1 を参照。尚体心立方格子をもつ反強磁性体に対するスピン波グリーン関数は Walker 等によっても計算されている (L. R. Walker, B. B. Cetlin and D. Hone, J. Phys. Chem. Solids 30 (1969) 923).

の交換積分であり、Dは一軸性異方性エネルギーの係数である。通常J_3で表わされる副格子内第二近接スピン間の交換積分はここでは考えない。特に$J_1=D=0$の場合には(1)は最近接スピン間の交換相互作用のみを持つ反強磁性体に対するハミルトニアンとなる。

ハミルトニアン(1)に関するスピン波グリーン関数は次のように定義される：

$$G(j,j';E)=\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{p_{k+}p_{k+}e^{ik\cdot(R_j-R_{j'})}}{E_{k+}^{(0)}-E}-\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{p_{k-}p_{k-}e^{ik\cdot(R_j-R_{j'})}}{E_{k-}^{(0)}-E}, \tag{2a}$$

$$G(j,l;E)=\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{p_{k-}q_{k-}e^{ik\cdot(R_j-R_l)}}{E_{k-}^{(0)}-E}-\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{p_{k+}q_{k+}e^{ik\cdot(R_j-R_l)}}{E_{k+}^{(0)}-E}, \tag{2b}$$

$$G(l,j;E)=\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{q_{k+}p_{k+}e^{ik\cdot(R_l-R_j)}}{E_{k+}^{(0)}-E}-\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{q_{k-}p_{k-}e^{ik\cdot(R_l-R_j)}}{E_{k-}^{(0)}-E}, \tag{2c}$$

$$G(l,l';E)=\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{q_{k-}q_{k-}e^{ik\cdot(R_l-R_{l'})}}{E_{k-}^{(0)}-E}-\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{q_{k+}q_{k+}e^{ik\cdot(R_l-R_{l'})}}{E_{k+}^{(0)}-E}, \tag{2d}$$

$$E_{k\pm}^{(0)}=\pm 2S\left[\{J_2z_2+J_1(z_1-\gamma_{1k})+D\}^2-J_2^2\gamma_{2k}^2\right]^{1/2}, \tag{3}$$

$$p_{k\pm}=\left[\frac{2S\{J_2z_2+J_1(z_1-\gamma_{1k})+D\}+E_{k\pm}^{(0)}}{2|E_{k\pm}^{(0)}|}\right]^{1/2}, \tag{4a}$$

$$q_{k\pm}=\left[\frac{2S\{J_2z_2+J_1(z_1-\gamma_{1k})+D\}-E_{k\pm}^{(0)}}{2|E_{k\pm}^{(0)}|}\right]^{1/2}, \tag{4b}$$

$$\gamma_{1k}=\sum_{\sigma}e^{ik\cdot R_\sigma}=z_1\cos(k_zc),\qquad z_1=2 \tag{5a}$$

$$\gamma_{2k}=\sum_{\rho}e^{ik\cdot R_\rho}=z_2\cos(k_xa/2)\cos(k_ya/2)\cos(k_zc/2),\qquad z_2=8. \tag{5b}$$

(2a〜d)に於てNは副格子内のスピンの数、又$\mathbf{k}$についての和は副格子がつくる逆格子の第一ブリルアン域内での和である。

(2a〜d)に(3)〜(5)を代入して和を積分に置きかえれば

$$\Gamma(j,j';\delta,\alpha_1;\varepsilon)\equiv 2S(J_2z_2+2J_1z_1+D)\cdot G(j,j';E)$$
$$=(1+2\alpha_1\zeta+\delta)\frac{8}{\pi^3}\iiint_0^{\pi/2}dx\,dy\,dz\cos[(n_x-n'_x)x]\cdot\cos[(n_y-n'_y)y]\cos[(n_z-n'_z)z]\times$$
$$\times\frac{[1+\alpha_1\zeta\{1-\cos(2z)\}+\delta]+(1+2\alpha_1\zeta+\delta)\cdot\varepsilon}{[1+\alpha_1\zeta\{1-\cos(2z)\}+\delta]^2-\cos^2x\cdot\cos^2y\cdot\cos^2z-(1+2\alpha_1\zeta+\delta)^2\varepsilon^2},$$
$$(|n_i|,|n'_i|\ (i=x,y,z):\text{even}),\tag{6a}$$

$$\Gamma(l,j;\delta,\alpha_1;\varepsilon)\equiv 2S(J_2z_2+2J_1z_1+D)\cdot G(l,j;E)$$
$$=-\Gamma(j,l;\delta,\alpha_1;\varepsilon)\equiv -2S(J_2z_2+2J_1z_1+D)\cdot G(j,l;E)$$
$$=(1+2\alpha_1\zeta+\delta)\frac{8}{\pi^3}\iiint_0^{\pi/2}dx\,dy\,dz\cos[(m_x-n_x)x]\cdot\cos[(m_y-n_y)y]\cdot\cos[(m_z-n_z)z]\times$$
$$\times\frac{\cos x\cdot\cos y\cdot\cos z}{[1+\alpha_1\zeta\{1-\cos(2z)\}+\delta]^2-\cos^2x\cdot\cos^2y\cdot\cos^2z-(1+2\alpha_1\zeta+\delta)^2\varepsilon^2},$$
$$(|m_i|:\text{odd},\ |n_i|:\text{even}),\tag{6b}$$

$$\Gamma(l,l';\delta,\alpha_1;\varepsilon)\equiv 2S(J_2z_2+2J_1z_1+D)\cdot G(l,l';E)$$
$$=(1+2\alpha_1\zeta+\delta)\frac{8}{\pi^3}\iiint_0^{\pi/2}dx\,dy\,dz\cos[(m_x-m'_x)x]\cdot\cos[(m_y-m'_y)y]\cdot\cos[(m_z-m'_z)z]\times$$
$$\times\frac{-[1+\alpha_1\zeta\{1-\cos(2z)\}+\delta]+(1+2\alpha_1\zeta+\delta)\cdot\varepsilon}{[1+\alpha_1\zeta\{1-\cos(2z)\}+\delta]^2-\cos^2x\cdot\cos^2y\cdot\cos^2z-(1+2\alpha_1\zeta+\delta)^2\varepsilon^2},$$
$$(|m_i|,|m'_i|:\text{odd}),\tag{6c}$$

但し $\varepsilon\equiv E/2S(J_2z_2+2J_1z_1+D)$, $\delta\equiv D/J_2z_2$,

$$\alpha_1\equiv J_1/J_2,\quad \zeta\equiv z_1/z_2=0.25.\tag{7}$$

(6a〜c)に於て我々は原点と上向きスピンの位置jとを結ぶ格子ベクトル$\mathbf{R}_j$及び原点と下向きスピンの位置lとを結ぶ格子

ベクトル$\mathbb{R}_\ell$をそれぞれ次のようにおいた:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{R}_j &= (n_x a/2,\ n_y a/2,\ n_z c/2) \qquad n_i = 0, \pm 2, \pm 4, \cdots\cdots \\
\mathbb{R}_\ell &= (m_x a/2,\ m_y a/2,\ m_z c/2) \qquad m_i = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \cdots\cdots
\end{aligned}
\tag{8}
$$

§2. スピン波グリーン関数の間の関係.

(6a〜c)よりスピン波グリーン関数の間には種々の関係があることが分かる。例えば、*)

$$\Gamma(j, j'; \delta, \alpha_1; \varepsilon) = -\Gamma(j+\ell, j'+\ell; \delta, \alpha_1; -\varepsilon), \tag{9}$$

$$\Gamma(\ell, j; \delta, \alpha_1; \varepsilon) = \Gamma(\ell, j; \delta, \alpha_1; -\varepsilon), \tag{10}$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{2\varepsilon}{z_2}\sum_{\rho}\Gamma(j,\rho;\delta,\alpha_1;\varepsilon) - 2\alpha_1\zeta\cdot\frac{(1+\alpha_1\zeta+\delta)}{(1+2\alpha_1\zeta+\delta)}\cdot\frac{1}{z_1}\sum_{\sigma}\{\Gamma(j,\sigma;\delta,\alpha_1;\varepsilon) \\
&\qquad\qquad + \Gamma(j+\ell,\sigma+\ell,\delta,\alpha_1;\varepsilon)\} \\
&+ \frac{\alpha_1^2\zeta^2}{(1+2\alpha_1\zeta+\delta)}\cdot\frac{1}{z_1^2}\sum_{\sigma\sigma'}\{\Gamma(j+\sigma,\sigma';\delta,\alpha_1;\varepsilon) + \Gamma(j+\sigma+\ell,\sigma'+\ell;\delta,\alpha_1;\varepsilon)\} \\
&= (1+2\alpha_1\zeta+\delta)\cdot 2\varepsilon\cdot\delta_{j,0} \\
&\quad -(1+2\alpha_1\zeta+\delta)\left\{\frac{(1+\alpha_1\zeta+\delta)^2}{(1+2\alpha_1\zeta+\delta)^2} - \varepsilon^2\right\}\{\Gamma(j,0;\delta,\alpha_1;\varepsilon) + \Gamma(j+\ell,\ell;\delta,\alpha_1;\varepsilon)\},
\end{aligned}
\tag{11}
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{2\varepsilon}{z_2}\sum_{\rho}\Gamma(j,\rho;\delta,\alpha_1;\varepsilon) \\
&= \frac{-1}{1+2\alpha_1\zeta+\delta}\cdot\frac{1}{z_2^2}\sum_{\rho\rho'}\{\Gamma(j+\rho-\ell,\rho'-\ell;\delta,\alpha_1;\varepsilon) + \Gamma(j+\rho,\rho';\delta,\alpha_1;\varepsilon)\},
\end{aligned}
\tag{12}
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{z_2}\sum_{\rho}\{\Gamma(0,\rho-\ell;\delta,\alpha_1;\varepsilon) + \Gamma(\ell,\rho;\delta,\alpha_1;\varepsilon)\} \\
&= (1+2\alpha_1\zeta+\delta)\cdot 2\varepsilon\cdot\Gamma(\ell,0;\delta,\alpha_1;\varepsilon)。
\end{aligned}
\tag{13}
$$

特に$\alpha_1 = 0$の場合には

$$(\varepsilon-1)\cdot\Gamma(j, j'; \delta, 0; \varepsilon) = (\varepsilon+1)\cdot\Gamma(j+\ell, j'+\ell; \delta, 0; \varepsilon) \tag{14}$$

*) ここで j(原点を含む), σ, $\ell+\ell'$ 等は上向き副格子に、又 ℓ, ρ, $j+\ell$ 等は下向き副格子に属することに注意.

なる関係も成り立つ。従って(11)～(14)より $\alpha_1=0$ の場合には

$$\frac{1}{z_2}\sum_{\rho}\Gamma(\rho,j;\delta,0;\varepsilon)=-\frac{1}{z_2}\sum_{\rho}\Gamma(j,\rho;\delta,0;\varepsilon)$$
$$=-(1+\delta)\cdot\delta_{j,0}+(1+\delta)(1-\varepsilon)\cdot\Gamma(j,0;\delta,0;\varepsilon) \qquad (15)$$

$$\frac{1}{z_2^2}\sum_{\rho\rho'}\Gamma(j+\rho,\rho';\delta,0;\varepsilon)$$
$$=(1+\delta)^2(1-\varepsilon)\delta_{j,0}-(1+\delta)^2(1-\varepsilon)^2\cdot\Gamma(j,0;\delta,0;\varepsilon) \qquad (16)$$

$$\frac{1}{z_2}\sum_{\rho}\Gamma(l,\rho;\delta,0;\varepsilon)=-(1+\delta)(1-\varepsilon)\cdot\Gamma(l,0;\delta,0;\varepsilon) \qquad (17)$$

等が成り立つ。(15),(16)に於て $j=0$ ととれば $\Gamma(\rho,0;\delta,0;\varepsilon)$ 及び $\Gamma(\rho,\rho';\delta,0;\varepsilon)$ を $\Gamma(0,0;\delta,0;\varepsilon)$ をもちいて表わす式が得られる．以上のようなグリーン関数の間の種々の関係はいくつかのグリーン関数の値を知って他の多くのグリーン関数の値を求める為ばかりではなく、別々に求められたグリーン関数の値の精度を調べる為にも用いられる。

§3．数値計算の方法

まずスピン波エネルギーバンド内の $\varepsilon\left(\frac{\sqrt{2\delta+\delta^2}}{1+2\alpha_1 z+\delta}<|\varepsilon|<1\right)$ に対するグリーン関数：$\Gamma(j,j';\delta,\alpha_1;\varepsilon+is)$，$\Gamma(l,j;\delta,\alpha_1,\varepsilon+is)$，$\Gamma(l,l';\delta,\alpha_1;\varepsilon+is)$ $(s\to+0)$ の数値計算の方法を述べる．今 $f(x)$ を任意の正則関数とし、$g(x)$ を $a<x<b$ の範囲で $g(x)=0$ をみたす x の値：x_0 をただ一つだけ持つ単調増加(或いは単調減少)関数とする。この時よく知られた公式：$\frac{1}{x\mp is}=P\frac{1}{x}\pm i\pi\delta(x)$ をつかえば

$$I=\int_a^b \frac{f(x)}{g(x)\mp i\delta}dx = P\int_a^b \frac{f(x)}{g(x)}dx \pm i\pi\frac{f(x_0)}{|g'(x_0)|}$$
$$=\int_a^b\left\{\frac{f(x)}{g(x)}-\frac{f(x_0)}{(x-x_0)g'(x_0)}\right\}dx+\frac{f(x_0)}{g'(x_0)}\ln\frac{b-x_0}{x_0-a}$$
$$\pm i\pi\frac{f(x_0)}{|g'(x_0)|}. \tag{18}$$

(18)の右辺にあらわれている積分の被積分関数は $a<x<b$ の範囲で正則であるから数値積分は簡単に行なうことが出来る。

(6a〜c)で与えられているグリーン関数に対しては、$1>|\varepsilon|>\frac{1+\delta}{1+2\alpha_1 3+\delta}$ の時はまず z についての積分を行なえばその時に上の方法が使え、又 $\frac{1+\delta}{1+2\alpha_1 3+\delta}>|\varepsilon|>\frac{\sqrt{2\delta+\delta^2}}{1+2\alpha_1 3+\delta}$ の時は積分変数を (x,y,z) から極座標 (r,θ,ϕ) に変換した後まず r についての積分を行なえばその時に上の方法が使える。

スピン波エネルギーバンドの外の ε $\left(|\varepsilon|<\frac{\sqrt{2\delta+\delta^2}}{1+2\alpha_1 3+\delta},\ |\varepsilon|>1\right)$ に対しては(6a〜c)は直接数値積分することが出来る。特に ε の値がエネルギーバンドから十分はなれている場合には、(6a〜c)の被積分関数の分母の三角関数を含む項をその他の項にくらべて小さいとして(展開して)得られる級数(この級数の各項はすべて積分可能である)の和を求めることによりグリーン関数の値を簡単に求めることが出来る。[*)] 又いくつかのグリーン関数は、バンドの外の ε に対して、より簡単な形に書き直すことが出来る。例えば $t\equiv(1+\delta)^2(\varepsilon^2-1)$ として $\alpha_1=0$ のとき

---

*) 実際にはこの方法は ε がバンド巾(あるいはそれ以下)しかバンドからはなれていない場合にもかなり有効である。

$$-\frac{\Gamma(000,000;\delta,0;\varepsilon)}{(1+\delta)^2(\varepsilon+1)} = -\frac{\Gamma(111,111;\delta,0;\varepsilon)}{(1+\delta)^2(\varepsilon-1)} = f_0(t), \tag{19a}$$

$$-\frac{\Gamma(111,11\bar{1};\delta,0;\varepsilon)}{(1+\delta)^2(\varepsilon-1)} = 2f_1(t)-f_0(t), \tag{19b}$$

$$-\frac{\Gamma(111,1\bar{1}\bar{1};\delta,0;\varepsilon)}{(1+\delta)^2(\varepsilon-1)} = 4f_2(t)-4f_1(t)+f_0(t), \tag{19c}$$

$$-\frac{\Gamma(111,\bar{1}\bar{1}\bar{1};\delta,0;\varepsilon)}{(1+\delta)^2(\varepsilon-1)} = 8-12f_2(t)+6f_1(t)-(1+8t)f_0(t), \tag{19d}$$

但し

$$f_0(t) = \frac{8}{\pi^3}\iiint_0^{\pi/2}\frac{1}{t+\cos^2x\cdot\cos^2y\cdot\cos^2z}\,dx\,dy\,dz, \tag{20a}$$

$$=\begin{cases}\dfrac{4}{\pi^2}\dfrac{1}{\sqrt{t}}\displaystyle\int_0^{\pi/2}\frac{1}{\sqrt{t+\cos^2z}}\cdot F\left(\frac{\cos z}{\sqrt{t+\cos^2z}}\right)dz, & (t>0) \quad (20b)\\[2ex] \dfrac{4}{\pi^2}\dfrac{1}{t}\displaystyle\int_0^{\pi/2}F\left(\cos z/\sqrt{-t}\right)dz, & (t<-1) \quad (20c)\end{cases}$$

$$f_1(t) = \frac{8}{\pi^3}\iiint_0^{\pi/2}\frac{\cos^2z}{t+\cos^2x\cdot\cos^2y\cdot\cos^2z}\,dx\,dy\,dz, \tag{21a}$$

$$=\begin{cases}\dfrac{4}{\pi^2}\dfrac{1}{\sqrt{t}}\displaystyle\int_0^{\pi/2}\frac{\cos^2z}{\sqrt{t+\cos^2z}}\cdot F\left(\frac{\cos z}{\sqrt{t+\cos^2z}}\right)dz, & (t>0) \quad (21b)\\[2ex] \dfrac{4}{\pi^2}\dfrac{1}{t}\displaystyle\int_0^{\pi/2}\cos^2z\cdot F\left(\cos z/\sqrt{-t}\right)dz, & (t<-1) \quad (21c)\end{cases}$$

$$f_2(t) = \frac{8}{\pi^3}\iiint_0^{\pi/2}\frac{\cos^2y\cdot\cos^2z}{t+\cos^2x\cdot\cos^2y\cdot\cos^2z}\,dx\,dy\,dz, \tag{22a}$$

$$=\begin{cases}\dfrac{4}{\pi^2}\dfrac{1}{\sqrt{t}}\displaystyle\int_0^{\pi/2}\left\{\sqrt{t+\cos^2z}\cdot E\left(\frac{\cos z}{\sqrt{t+\cos^2z}}\right)-\frac{t}{\sqrt{t+\cos^2z}}\cdot F\left(\frac{\cos z}{\sqrt{t+\cos^2z}}\right)\right\}dz, & (t>0) \quad (22b)\\[2ex] \dfrac{4}{\pi^2}\displaystyle\int_0^{\pi/2}\left\{E\left(\frac{\cos z}{\sqrt{-t}}\right)-F\left(\frac{\cos z}{\sqrt{-t}}\right)\right\}dz, & (t<-1) \quad (22c)\end{cases}$$

ここで $F(k)$, $E(k)$ はそれぞれ第一種, 第二種の完全楕円積分である. $t\to+0$ で $f_0(t)$, $f_1(t)$, $f_2(t)$ は発散する. それぞれの leading term は $(\ln t)^2/2\pi^2\sqrt{t}$, $-c_1\ln t/\sqrt{t}$, $c_2/\sqrt{t}$ (c_1, c_2 は正の常数) となる.

§4. 数値計算の結果

§3で述べた方法により$\delta=\alpha_1=0$の場合及び反強磁性体MnF_2に対するδ, α_1の値：$\delta=0.016$, $\alpha_1=0.18$の場合について、種々のグリーン関数のバンド内のεに対する数値を求めた。*) 数値積分は分点数が28のガウス法によった。次頁の図に

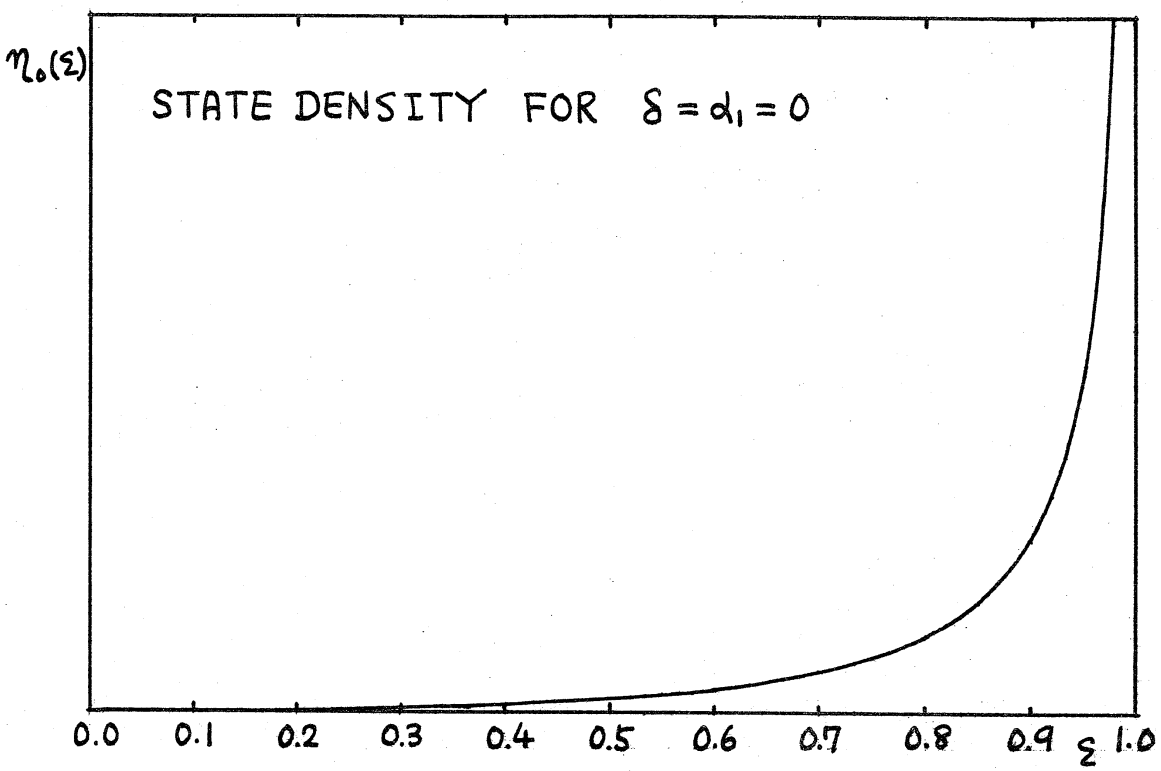
$$\eta_0(\varepsilon)=\frac{1}{\pi}\{\mathrm{Im}[\Gamma(j,j;\delta,\alpha_1;\varepsilon+is)] + \mathrm{Im}[\Gamma(\ell,\ell;\delta,\alpha_1;\varepsilon+is)]\} \qquad (23)$$

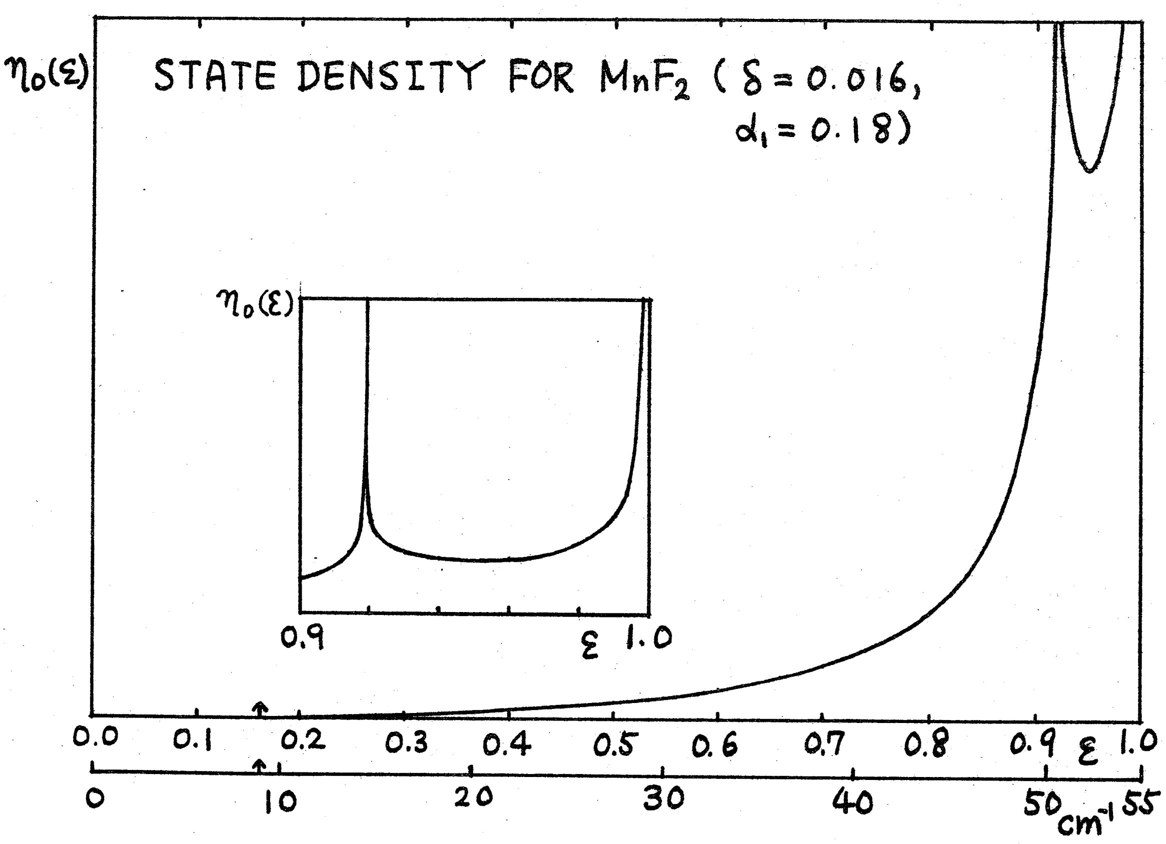
より計算されるスピン波状態密度：$\eta_0(\varepsilon)$の結果を示す。$\delta=\alpha_1=0$の場合、$|\varepsilon|$が1に近ずくにつれてグリーン関数の計算の精度は悪くなるが（$\delta=\alpha_1=0$の場合Van Hove singularityは$|\varepsilon|=1$のみで起る）、実数部については$|\varepsilon|\lesssim 0.99$で2～4桁の有効数字で、又虚数部については$|\varepsilon|\lesssim 0.999$で5～8桁の有効数字で結果が求められた。**) $\delta=0.016$, $\alpha_1=0.18$の場合の有効数字も特別な場合を除いて同程度である。特に実数部に対する計算の精度をよくする為には、数値積分の分点数を増すこと及び場合によっては倍数精度の計算を行なうことが必要である。尚(20)～(22)で与えられている$f_0(t)$, $f_1(t)$, $f_2(t)$についても十分よい精度で数値を求めた。*)

---

*) くわしい結果を必要とされる方は著者に連絡されたい。

**) これらの精度は§2で述べたグリーン関数の間の関係式をもちいて評価したものである。


$\eta_0(\varepsilon)$
STATE DENSITY FOR $\delta = \alpha_1 = 0$
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
ε
1.0


$\eta_0(\varepsilon)$
STATE DENSITY FOR MnF_2 ($\delta = 0.016$, $\alpha_1 = 0.18$)
$\eta_0(\varepsilon)$
0.9
ε
1.0
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
ε
1.0
0
10
20
30
40
50
cm^{-1}
55