数理解析研究所講究録
第 130 巻 1971 年 67-77

格子グリーン関数に対するMellin-Barnes積分の応用 ー単純立方格子ー

東北大工　　猪苗代盛

§1. 序

格子グリーン関数を具体的に計算する場合に格子スペクトルの中のエネルギーに対する表式を、格子スペクトル外のエネルギーに対する表式から解析接続によって求めることは一つの有力な方法と考えられる。我々はMellin-Barnes積分[1)]を利用して解析接続によりグリーン関数の種々の巾級数表示を求める。

(1) Mellin-Barnes積分

Mellin-Barnes積分

$$f(z)=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\phi(s)z^{-s}\,ds \quad , \quad |\arg z|<\pi \tag{1·1}$$

$$\phi(s)=\frac{\Gamma(\alpha_1+s)\cdots\Gamma(\alpha_m+s)\Gamma(\beta_1-s)\cdots\Gamma(\beta_n-s)}{\Gamma(\gamma_1+s)\cdots\Gamma(\gamma_p+s)\Gamma(\delta_1-s)\cdots\Gamma(\delta_q-s)} \tag{1·2}$$

と考える.

積分の収束性をしらべるために

$$s=\sigma+it \qquad z=Re^{i\phi} \tag{1.3}$$

と書き $|t|\to\infty$ での被積分関数の行動をしらべる。

$$|z^{-s}|=R^{-\sigma}e^{\phi t} \tag{3}$$

$$|\Gamma(s)|=|\Gamma(\sigma+it)| \simeq e^{-\frac{1}{2}\pi|t|}|t|^{\sigma-\frac{1}{2}} \quad , \quad |t|\to\infty \tag{4}$$

従って $|t|\to\infty$ のとき *integrand* の絶対値は

$$e^{-\frac{1}{2}K\pi|t|}\,|t|^{K\sigma+k}\,R^{-\sigma}e^{\phi t} \tag{5}$$

となる。ここで

$$K=m+n-p-q$$
$$\mathbf{K}=m-n-p+q \tag{6}$$
$$k=(\alpha_1-\tfrac{1}{2})+(\alpha_2-\tfrac{1}{2})+\cdots+(\beta_1-\tfrac{1}{2})+(\beta_2-\tfrac{1}{2})+\cdots$$
$$-(\gamma_1-\tfrac{1}{2})-(\gamma_2-\tfrac{1}{2})-\cdots-(\delta_1-\tfrac{1}{2})-(\delta_2-\tfrac{1}{2})-\cdots$$

ここで $K, \mathbf{K}, k$ の値によりいくつかの場合に分けて考える。

i) 第I型： $K>0$ 即ち $m+n>p+q$

(分子の Γ 関数の数が分母の Γ 関数の数より多い)

積分(1)は $|\arg z|<\min(\pi, \frac{1}{2}K\pi)$ で収束し，z の解析関数である。

ii) 第II型： $K=0$ i.e. $m+n=p+q$ (分母と分子の Γ 関数の数が等しい。)

and $\mathbf{K}=m-n-p+q \neq 0$

このとき integrand は large $|t|$ に対して

$$|t|^{K\sigma+k} R^{-\sigma} e^{\phi t}$$

となる。積分が収束するためには $\phi=0$ 即ち z は正の数でなければならない。結局 integrand は

$$|t|^{K\sigma+k} R^{-\sigma} \tag{7}$$

となる。

$K\sigma+k<-1$ なら積分は絶対収束し（$K\sigma+k<0$ なら収束）

$K<0$ なら

$$f(R)=\left[\frac{1}{2\pi i}\int \Phi(s) z^{-s}\, ds\right]_{z=R} \tag{8}$$

$K>0$ なら

$$f(R)=\left[\frac{1}{2\pi i}\int \Phi(s) z^{-s}\, ds\right]_{z=R} \tag{8'}$$

とあらわせることが示される。ここで(8), (8)′の[ ]内の積分は complex z に対して収束し，$|\arg z|<\pi$ で z の analytic function である。

iii) 第III型：$\left.\begin{matrix} K=0 \\ K=0 \end{matrix}\right\}$ i.e. $m=p,\ n=q$

$k<-1$

ii) と同様に z が正のときだけ収束する。従って integrand は

$$|t|^{k} R^{-\sigma} \tag{9}$$

となる。$k<-1$ で積分は絶対収束し

$R>1$ ならば

$$f(R)=\left[\frac{1}{2\pi i}\int_{\rightarrow}\phi(s)\,z^{-s}\,ds\right]_{z=R} \tag{10}$$

$R<1$ ならば

$$f(R)=\left[\frac{1}{2\pi i}\int_{\leftarrow}\phi(s)\,z^{-s}\,ds\right]_{z=R} \tag{10'}$$

とあらわせることが示される。ここで(10),(10)′の[ ]内の積分は$|\arg z|<\pi$かつ$|z|\gtrless 1$でzのanalytic functionである。

一般にこの二つのanalytic functionは同じ関数とは限らない。しかし、(1)は絶対収束なので$z=1$で連続である。

iv)第IV型： $\left.\begin{matrix}K=0\\ K'=0\end{matrix}\right\}$ i.e. $m=p,\ n=q$

$-1\leq k<0$

$z\neq 1$では第III型と同様な性質をもつ。

$z=1$では連続とは限らなくなる。

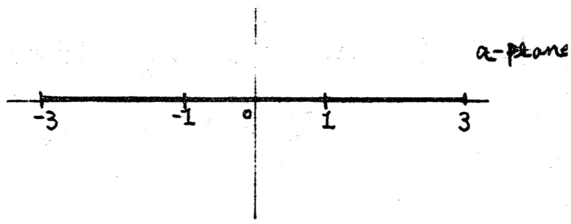
§ 2. 単純立方格子のグリーン関数[2)]

単純立方格子の原点におけるグリーン関数は

$$I(a)=\frac{1}{\pi^3}\iiint_0^{\pi}\frac{dx\,dy\,dz}{a-\cos x-\cos y-\cos z} \tag{2·1}$$

であらわされる。[2)] この関数は複素a平面で実軸上の線分$-3\leq a\leq 3$以外の領域で正則な関数である。

$-3<a<3$ では $a=\pm1,\pm3$ が特異点になっている。(Van Hove singularities)



$I(a)$をMellin-Barnes積分であらわすと$a>3$ではよく知られた級数表示がえられる。Mellin-Barnes積分の変形により $0<a<1$ 及び $1<a<3$ のexpressionがえられる。$a<0$ の表式は(2.1)の形を考慮すると$a>0$の表式から直ちにえられる。

$\mathrm{Im}\, a>0$ ならば

$$
\begin{aligned}
I(a) &= -\frac{i}{\pi^3}\int_0^\infty dt\int_0^\pi dx\int_0^\pi dy\int_0^\pi dz \\
&\quad \times \exp\left[i(a-\cos x-\cos y-\cos z)t\right] \\
&= -i\int_0^\infty e^{iat}\left[J_0(t)\right]^3 dt \qquad (2.2)
\end{aligned}
$$

$[J_0(t)]^2$をMellin-Barnes積分であらわすと

$$
[J_0(t)]^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2\pi i}\int_{-\delta-i\infty}^{-\delta+i\infty}\frac{\Gamma(-s)\Gamma(s+\frac{1}{2})t^{2s}}{[\Gamma(s+1)]^2}
$$

従って

$$
I(a) = \frac{-i}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2\pi i}\int_{-\delta-i\infty}^{-\delta+i\infty} ds\, \frac{\Gamma(-s)\Gamma(s+\frac{1}{2})}{[\Gamma(s+1)]^2}\int_0^\infty e^{iat} J_0(t)\, t^{2s}\, dt
$$

tに関する積分は$\mathrm{Im}\,\alpha>0$で収束しhypergeometric functionを使つてあらわされる。

$$\int_0^\infty dt \cdots = \frac{\Gamma(2s+1)}{(-i\alpha)^{2s+1}}\ {}_2F_1\left(s+\tfrac{1}{2}, s+1; 1; \tfrac{1}{\alpha^2}\right)$$

従つて

$$I(\alpha)=\frac{1}{\pi\alpha}\frac{1}{2\pi i}\int ds\ \frac{\Gamma(-s)[\Gamma(s+\frac{1}{2})]^2}{\Gamma(s+1)}\left(-\frac{4}{\alpha^2}\right)^s$$
$$\times\ {}_2F_1\left(s+\tfrac{1}{2}, s+1\ ;\ 1\ ;\ \tfrac{1}{\alpha^2}\right) \qquad (2{\cdot}3)$$

§2-1　$\alpha>3$

$|\alpha|>1$ なら${}_2F_1$を$\frac{1}{\alpha^2}$の級数に展開できる。

$$I(a)=\frac{1}{\pi a}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,n!}\left(\frac{1}{a^2}\right)^n$$
$$\times\frac{1}{2\pi i}\int ds\left(-\frac{4}{a^2}\right)^s\frac{\Gamma(-s)\Gamma(s+\frac{1}{2})\Gamma(s+\frac{1}{2}+n)\Gamma(s+1+n)}{[\Gamma(s+1)]^2}$$

s－積分はMellin-Barnes積分の第I型であり$|\alpha|>2$なら積分路は右半平面へ閉じさせることができる。このとき

$s=0,1,2,\cdots,m,\cdots$が1位の極で留数計算により

$$I(a)=\frac{1}{\pi a}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\Gamma(m+\frac{1}{2})\Gamma(m+n+\frac{1}{2})\Gamma(m+n+1)4^m}{(n!)^2\quad(m!)^3}\left(\frac{1}{a^2}\right)^{m+n} \qquad (2{\cdot}4)$$

がえられる。この２重級数は$|\alpha|>3$で収束することが示される。和の順序変更により$\frac{1}{\alpha^2}$の巾級数がえられる。

$$I(a)=\frac{1}{\pi a}\sum_{p=0}^{\infty}\Gamma(p+\tfrac{1}{2})\,\Gamma(p+1)\left(\frac{1}{a^2}\right)^p$$

$$\times\sum_{m=0}^{p}\frac{\Gamma(m+\frac{1}{2})\,4^m}{(m!)^3\,[(p-m)!]^2} \qquad (2\cdot5)$$

あきらかに

$|a|>3$ に対しては $I(a)$ は実数で虚数部は 0 である。

§2-2　$0<a<1$

${}_2F_1(\ ;\ ;\ 1/a^2)$ の　$0<a<1$ における関数形は Kummer の relation により ${}_2F_1(\ ;\ ;\ a^2)$ であらわされる。

従って(2·3)は

$$I(a)=\frac{1}{\pi a}\frac{1}{2\pi i}\int ds\,\frac{\Gamma(-s)\,[\Gamma(s+\frac{1}{2})]^2}{\Gamma(s+1)}\left(-\frac{4}{a^2}\right)^s$$

$$\times\left[\frac{\Gamma(-\frac{1}{2})}{\Gamma(s+\frac{1}{2})\,\Gamma(-s)}\left(-\frac{1}{a^2}\right)^{-s-1}{}_2F_1(s+1,\ s+1;\ \tfrac{3}{2};\ a^2)\right.$$

$$\left.+\frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(s+\frac{1}{2})\,\Gamma(-s+\frac{1}{2})}\left(-\frac{1}{a^2}\right)^{-s-\frac{1}{2}}{}_2F_1(s+\tfrac{1}{2},\ s+\tfrac{1}{2};\ \tfrac{1}{2};\ a^2)\right]$$

$$=I_R(a)+i\,I_I(a) \qquad (2\cdot6)$$

ここで s-積分をあらかじめ左半面にまわしておく。

右辺の ${}_2F_1$ を展開すると、

$$I_k(a) = a\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^{2n}}{n!\,\Gamma(n+\frac{3}{2})}\frac{1}{2\pi i}\int ds \frac{\Gamma(s+\frac{1}{2})[\Gamma(s+1+n)]^2 4^s}{[\Gamma(s+1)]^3}$$

$s+\frac{1}{2}=0,-1,-2,\cdots$ に1位の極があり，その留数を計算することにより

$$I_k(a) = -\frac{a}{2\pi}\sum_{n}^{\infty}\sum_{m}^{\infty}\frac{[\Gamma(\frac{1}{2}+m)]^3(\frac{1}{4})^m a^{2n}}{n!\,m!\,\Gamma(\frac{3}{2}+n)[\Gamma(\frac{1}{2}-n+m)]^2} \qquad (2\cdot7)$$

これは$|a|<1$で収束する。

同様にして

$$I_I(a) = -\frac{1}{2\pi^2}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{[\Gamma(m+n+\frac{1}{2})]^3(\frac{a^2}{4})^n(\frac{1}{4})^m}{n!\,\Gamma(\frac{1}{2}+n)(m!)^2\Gamma(m+n+1)} \qquad (2\cdot7)'$$

$$\times\left\{-3\psi(\tfrac{1}{2}+m+n)+2\psi(1+m)+\psi(1+m+n)+\log 4\right\}$$

（ψは2位の極の留数から出てくる。）

§2-3　$1<a<3$

この変数の範囲に対しては$a^2=5$を中心とする展開が求められる。これは$|a^2-5|<4$ i.e. $1<a<3$で収束する。

a^2の大きな値に対し（2.4）を

$$I(a) = \frac{1}{\pi a}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{[\Gamma(\frac{1}{2}+m)]^2}{(m!)^2}\left(\frac{4}{a^2}\right)^m {}_2F_1(m+1, m+\tfrac{1}{2}, 1; \tfrac{1}{a^2}) \qquad (2\cdot8)$$

Kummer's relation

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{-a}{}_2F_1(a, c-b, c; \tfrac{z}{z-1}) \qquad (2\cdot9)$$

を使うと

$$I(a) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a^2-1}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{m=0}^{\infty}\left[\frac{\Gamma(\frac{1}{2}+m)}{m!}\right]^2\left(\frac{1}{a^2-1}\right)^m {}_2F_1(m+\tfrac{1}{2}, -m, 1; \tfrac{1}{1-a^2})$$

${}_2F_1$を展開し和の順序を変えると

$$I(a)=\frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a^2-1}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\frac{1}{2}+n)\Gamma(\frac{1}{2}+2n)}{(n!)^3}\left(\frac{2}{a^2-1}\right)^{2n}$$

$$\times {}_2F_1\left(\frac{1}{2}+n,\frac{1}{2}+2n;1+n;\frac{4}{a^2-1}\right)$$

再びKummer's relation (2-9)を使うと

$$I(a)=\frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\frac{1}{2}+n)\Gamma(\frac{1}{2}+2n)}{(n!)^3}\,4^n\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^{2n+\frac{1}{2}}$$

$$\times {}_2F_1\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}+2n;1+n;\frac{4}{5-a^2}\right)$$

$$=\frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2\pi i}\int\frac{\Gamma(-t)\Gamma(\frac{1}{2}+t)\Gamma(\frac{1}{2}+2t)}{[\Gamma(1+t)]^2}\left\{-4\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^2\right\}^t dt$$

$$\times {}_2F_1\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}+2t;1+t;\frac{4}{5-a^2}\right)$$

hypergeometric functionの$\left|\frac{4}{5-a^2}\right|>1$に対する表現を入れれば

$$I(a)=\frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2\pi i}\int\frac{\Gamma(-t)\Gamma(\frac{1}{2}+t)\Gamma(\frac{1}{2}+2t)}{[\Gamma(1+t)]^2}\left\{-4\left(\frac{1}{a^2-5}\right)^2\right\}^t dt$$

$$\times\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\Gamma(\frac{1}{2}+n)\Gamma(2t-n)}{n!\,\Gamma(\frac{1}{2}-n+t)}\left(\frac{a^2-5}{4}\right)^{n+\frac{1}{2}}\right.$$

$$\left.+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\Gamma(\frac{1}{2}+2t+n)\Gamma(-n-2t)}{n!\,\Gamma(\frac{1}{2}-n-t)}\left(\frac{a^2-5}{4}\right)^{n+2t+\frac{1}{2}}\right]$$

この中の積分はMellin-Barnes積分の第Ⅰ型であり，左半面に積分路を閉じると留数計算により

$$I(a)=I_R(a)+I_I(a) \tag{2.10}$$

$$I_R(a)=\frac{1}{4\pi^{\frac{3}{2}}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\left(\frac{a^2-5}{4}\right)^n$$

$$\times\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m\Gamma(\frac{1}{2}+m)\Gamma(\frac{1}{2}+n+m)\Gamma(\frac{1}{2}+n+2m)}{(m!)^2(n+2m)!}\left(\frac{1}{4}\right)^m$$

$$\times \left\{ \psi\left(\tfrac{1}{2}+m\right) - \psi\left(\tfrac{1}{2}+n+m\right) - 2\psi\left(\tfrac{1}{2}+n+2m\right) + 2\psi(1+m) + 2\psi(1+n+2m) + \log 4 \right\} \tag{2.11}$$

$$I(a) = \frac{-i}{2\pi^{\frac{5}{2}}} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(p+1)!} \left(\frac{5-a^2}{4}\right)^{p+1} \times \sum_{n=0}^{\leq \frac{p}{2}} \frac{4^n [\Gamma(\frac{1}{2}+n)]^2 \Gamma(p-2n+\frac{1}{2}) \Gamma(p-n+1)}{n!\ \Gamma(p-2n+1)}$$

$$-\frac{i}{4\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+m)\Gamma(\frac{1}{2}+n+m)\Gamma(\frac{1}{2}+n+2m)}{(m!)^2\, n!\, (n+2m)!} \times \left(\frac{-1}{4}\right)^m \left(\frac{5-a^2}{4}\right)^n \tag{2.11$'$}$$

§3. 任意の格子点におけるグリーン関数

$$I_{lmn}(a) = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{\cos lx \cos my \cos nz}{a - \cos x - \cos y - \cos z}\, dx\, dy\, dz$$

にも同様な計算を行うことができる。その他2次元の rectangular lattice 及びその特別な場合として square lattice の場合も、Mellin-Barnes 積分を利用して級数表示が求められている。

§4 問題点

この Mellin-Barnes 積分の方法では、simple cubic lattice のグリーン関数の $a=1$ 及び $a=3$ における展開がまだ見出されていない。格子点 l, m, n が原点からはなれている場合のグリーン関数の漸近形と共に、今後に残された問題である。

reference

1). Bateman's Manuscript Project. Higher Transcendental Functions, ed. A. Erdélyi, McGraw-Hill, New York (1953);
A. L. Dixon and W. L. Ferrar, Quant. J. Math., Oxford.

2). S. Katsura, S. Inawashiro, and Y. Abe, J. Math. Phys. (1971).

3). S. Katsura and S. Inawashiro, J. Math. Phys. (1971).