数理解析研究所講究録
第 130 巻 1971 年 200-210



# 摂動法による三次元 Diatomic Lattice の分散関係及び Free Energy

北大 理　和田 宏

## §1. 序

Mattuck は $T=0°K$ で Einstein phonon から出発し、Green 関数の摂動展開を行い、diagram を全部集めることによって、単原子鎖の分散関係と零点振動のエネルギーを正確に求めている。彼の計算において、相互作用の項自体はかならずしも小さくなく、摂動展開及びその収束性はしたがって数学的には怪しいが、正しい結果が得られるという意味で、exact に解ける多体問題の一つの簡単な sample を与えている。

吾々は同じ精神に基づいて、$T \neq 0°K$ の場合に対して、温度 Green 関数を使って、適当な virtual monatomic lattice を無摂動 Hamiltonian に選ぶことによって、diatomic lattice の分散関係とその Free energy を三次元の場合に求めてみた。自由エネルギーの計算は Mattuck の基底エネルギーの計算に比べて、多少簡単になっていると思われる。

§2. model Hamiltonian と $k$表示による第二量子化

無摂動Hamiltonianとして nearest neighbour interaction を持つ次の Hamiltonianを選ぶ。

$$(1)\quad H_0=\sum_{l,m,n}\frac{P(l,m,n)^2}{2m_0}+\sum_{l,m,n}\Big[\frac{\gamma_1}{2}\left(u(l+1,m,n)-u(l,m,n)\right)^2 + \frac{\gamma_2}{2}\left(u(l,m+1,n)-u(l,m,n)\right)^2+\frac{\gamma_3}{2}\left(u(l,m,n+1)-u(l,m,n)\right)^2\Big].$$

吾々は$(2N)^3$個の原子を考え、かつ、$x,y,z$方向で各々$2N$個ごとに周期境界条件を満足している Simple Cubic lattice を仮定している。また virtual mass $m_0$は

$$(2)\qquad \frac{2}{m_0}=\frac{1}{M}+\frac{1}{m}$$

で定義される。

もし、NaCl 型の結晶を考え質量$M$と$m$が交互に配列されているとするならば、(2)式によって定義される質量$m_0$を host と考えたときの全系の Hamiltonian $H$と$H_0$の差は

$$(3)\quad H_1=\sum_{l_1+l_2+l_3=\text{even}}\frac{1}{2}\left(\frac{1}{M}-\frac{1}{m_0}\right)P^2(l_1,l_2,l_3)+\sum_{l_1+l_2+l_3=\text{odd}}\frac{1}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_0}\right)P^2(l_1,l_2,l_3).$$

吾々は(1)式を無摂動Hamiltonian と考え(3)式を摂動項とみなし、温度Green関数法によって Hamiltonian $H$の基準振動数と Free energy を求める。

今、変位 $u(\vec{l})$, ($\vec{l}\equiv(l_1,l_2,l_3)$)及び運動量$p(\vec{l})$をフーリエ展開すると、

(4)
$$u(\vec{l}) = \frac{1}{\sqrt{2N^3}} \sum_{\mathbb{k}} \Phi(\mathbb{k}) e^{-i\mathbb{k}\cdot\vec{l}}$$
$$P(\vec{l}) = \frac{1}{\sqrt{2N^3}} \sum_{\mathbb{k}} P(\mathbb{k}) e^{+i\mathbb{k}\cdot\vec{l}}$$

ここで

(5)
$$\Phi(\mathbb{k}) = -i\left(\frac{1}{2m_0\omega_0(\mathbb{k})}\right)^{\frac{1}{2}}(a_{\mathbb{k}}^{+} - a_{-\mathbb{k}})$$
$$P(\mathbb{k}) = \left(\frac{m_0\omega_0(\mathbb{k})}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a_{\mathbb{k}} + a_{-\mathbb{k}}^{+})$$

かつ、$\omega_0^2(\mathbb{k})$ は無摂動系の固有振動数で

(6)
$$\omega_0(\mathbb{k})^2 = \frac{2\gamma_1(1-\cos k_1) + 2\gamma_2(1-\cos k_2) + 2\gamma_3(1-\cos k_3)}{m_0}$$

で定義される。また $[a_{\mathbb{k}}, a_{\mathbb{k}'}^{+}] = \delta_{\mathbb{k},\mathbb{k}'}$, $[a_{\mathbb{k}}, a_{\mathbb{k}'}] = [a_{\mathbb{k}}^{+}, a_{\mathbb{k}'}^{+}] = 0$。

(4),(5),(6) 式を (1) 式に代入すると

(7)
$$H_0 = \sum_{\mathbb{k}} \omega_0(\mathbb{k})\left(a_{\mathbb{k}}^{+}a_{\mathbb{k}} + \frac{1}{2}\right)$$

を得る。簡単のために常に $\hbar = 1$ に取られている。

一方、摂動項は、(4) 式を代入すると、

(8)
$$H' = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{M} - \frac{1}{m_0}\right)\frac{1}{(2N)^3}\sum_{\mathbb{k}_1,\mathbb{k}_2} P(\mathbb{k}_1)P^*(\mathbb{k}_2)\sum_{l_1+l_2+l_3=\text{even}} e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{l}}$$
$$+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{m_0}\right)\sum_{\mathbb{k}_1,\mathbb{k}_2} P(\mathbb{k}_1)P^*(\mathbb{k}_2)\frac{1}{(2N)^3}\sum_{l_1+l_2+l_3=\text{odd}} e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{l}},$$

ここで wave vector $\mathbb{k} = (k^1, k^2, k^3)$ は $H_0$ の unit cell $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ の逆格子空間の First Brillouin zone 内のベクトルである。すなわち、$s_1, s_2, s_3$ を整数として

(9)
$$-\pi \le k^1 = \frac{2\pi s_1}{2N} < \pi, \quad -\pi \le k^2 = \frac{2\pi s_2}{2N} < \pi, \quad -\pi \le k^3 = \frac{2\pi s_3}{2N} < \pi.$$

次に

(10)
$$\sum_{l_1+l_2+l_3=\text{even}} e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{l}}$$

なる和を考える。

$l_1+l_2+l_3=\mathrm{even}$ の条件での和は

$$
(11)\quad
\begin{aligned}
\vec{a}_1 &= (0, 1, 1) = \quad\ \ \vec{e}_2+\vec{e}_3 \\
\vec{a}_2 &= (1, 0, 1) = \vec{e}_1 \quad\ \ +\vec{e}_3 \\
\vec{a}_3 &= (1, 1, 0) = \vec{e}_1+\vec{e}_2
\end{aligned}
$$

を primitive vector とする面心立方格子（F.C.C)を考えていることになる。（但し. cell の数は $N^3$個）

(10)式を F.C.C.格子の格子点に関する和と読みかえると (10)式は

$$
(12)\quad \sum_{\vec{l}\in \mathrm{F.C.C.}} e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{l}} = \frac{1}{2}(2N)^3 \sum_n \delta_{\mathbb{k}_1, \mathbb{k}_2+g_n}
$$

ここで、$\vec{g}_n$ は(11)式で定義される F.C.C.格子の逆格子ベクトルであり. primitive vector は

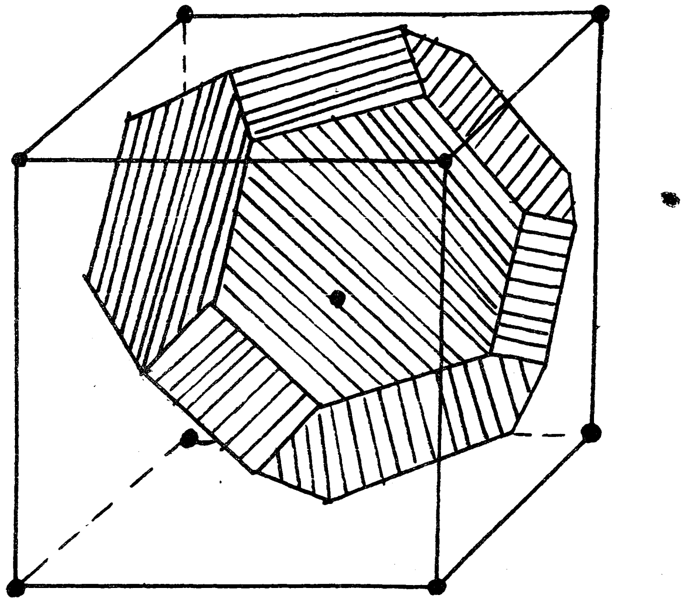
$$
(13)\quad
\begin{aligned}
\vec{g}_1 &= \pi(-1, 1, 1) \\
\vec{g}_2 &= \pi(1, -1, 1) \\
\vec{g}_3 &= \pi(1, 1, -1) .
\end{aligned}
$$

また.

$$
(14)\quad \sum_{l_1+l_2+l_3=\mathrm{odd}} e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{l}} = e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{e}_1} \sum_{l_1+l_2+l_3=\mathrm{even}} e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{l}}
$$
$$
= e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\cdot\vec{e}_1} \frac{(2N)^3}{2} \sum_n \delta_{\mathbb{k}_1, \mathbb{k}_2+\vec{g}_n}
$$

そこで(8)式の $\vec{l}$ に関する和を考えると. $\mathbb{k}_1=\mathbb{k}_2$ に対しては(2)式の関係により零となる。一方. $\mathbb{k}_1$, $\mathbb{k}_2$ が (9)式を満足しなければならないために、$\mathbb{k}_2$を例へば固定すると唯一つの $\vec{g}_n$のみが許されることがわかる。言い変えると図のような B.C.C. の第一、第二 Brillouin zone（以下 1 B.Z., 2 B.Z. と略記する。）を考えたとき. 2 B.Z. を 1 B.Z. に reduce すると.互いに重なり合うような点 $\mathbb{k}_1$, $\mathbb{k}_2$ の pair のみが(8)式に寄与する。以下.そのよ

うな pair を $(\mathbb{k}, \mathbb{k}+g)$, $(\mathbb{k}-g, \mathbb{k})$ のように書く。前者は $\mathbb{k}$ を 1 B.Z. に属するとしたときで後者は $\mathbb{k}$ が 2 B.Z. に属すると考えたときの記号とする。



F.C.C.格子の逆格子（B.C.C.）の第一、第二 Brillouin Zone

このような $(\mathbb{k}_1, \mathbb{k}_2)$ に対しては常に $e^{i(\mathbb{k}_1-\mathbb{k}_2)\vec{e}_1}=-1$ である事に注意すると、(8)式の $H'$ は次のように表現される。

$$(15)\qquad H' = \frac{1}{2} Q \sum_{\mathbb{k}}^{(1.B.Z)} \sqrt{\omega_0(\mathbb{k}+g)\,\omega_0(\mathbb{k})}\,(a_{\mathbb{k}+g}+a^+_{-(\mathbb{k}+g)})(a^+_{\mathbb{k}}+a_{-\mathbb{k}})$$

$$= \frac{1}{2} Q \sum_{\mathbb{k}}^{(2.B.Z)} \sqrt{\omega_0(\mathbb{k})\,\omega_0(\mathbb{k}-g)}\,(a_{\mathbb{k}-g}+a^+_{-(\mathbb{k}-g)})(a^+_{\mathbb{k}}+a_{-\mathbb{k}}),$$

ここで、$Q \equiv \dfrac{m-M}{m+M}$ 及び簡単のために

$$(16)\qquad I(\mathbb{k}+g, \mathbb{k}) \equiv \frac{1}{2} Q \sqrt{\omega_0(\mathbb{k}+g))\,\omega_0(\mathbb{k})} = \frac{1}{2} Q \sqrt{\omega_0(\mathbb{k})\,\omega_0(\mathbb{k}+g))}$$

$$\equiv I(\mathbb{k}, \mathbb{k}+g)$$

を導入する。

## §.3. phonon Green関数と分散関係

phonon displacement operator $\phi_{\mathbf{k}}(u)$

(17)
$$\phi_{\mathbf{k}}(u) = a_{\mathbf{k}}(u) + a_{-\mathbf{k}}(u)^{+}$$
$$\phi_{-\mathbf{k}}(u) = a^{+}_{\mathbf{k}}(u) + a_{-\mathbf{k}}(u) = \phi^{+}_{\mathbf{k}}(u)$$

を導入する。$a_{\mathbf{k}}(u)$, $a^{+}_{\mathbf{k}}(u)$ は

(18)
$$a_{\mathbf{k}}(u) = e^{uH} a_{\mathbf{k}} e^{-uH}, \quad a^{+}_{\mathbf{k}}(u) = e^{uH} a^{+}_{\mathbf{k}} e^{-uH}$$

で定義される. Heisenberg表示の創生,消滅演算子である。

(17)の演算子を使うと. phonon Green関数は

(19)
$$D(\mathbf{k}, u) = \langle T(\phi_{\mathbf{k}}(u)\phi_{-\mathbf{k}}(0))\rangle$$

で定義される。Tは$u$をならべる time ordering operator で.

かつ. $\langle A(u)\rangle \equiv Tr(e^{-\beta H} A(u))/Tr(e^{-\beta H})$ のような全系に関する温度平均である。$\left(\beta = \dfrac{1}{kT}\right)$

$\beta$ の周期性と Boson の性質を使うと Fourier展開が可能である。

(20)
$$D[\mathbf{k}, u] = \frac{1}{\beta}\sum_{l} D(\mathbf{k}, i\nu_l) e^{-i\nu_l u}$$
$$\nu_l = \frac{2\pi l}{\beta} \quad (l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\cdots).$$

free propagator に対しては

(21)
$$D_0(\mathbf{k}, u] = \langle T(\phi_{\mathbf{k}}(u)\phi_{-\mathbf{k}}(0))\rangle_0 = \frac{1}{\beta}\sum_{l} D_0(\mathbf{k}, i\nu_l) e^{-i\nu_l u}$$

容易に定義から次式を得る。

(22)
$$D_0[\mathbf{k}, i\nu_l] = \frac{1}{i\nu_l + \omega_0(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\nu_l - \omega_0(\mathbf{k})} = \frac{-2\omega_0(\mathbf{k})}{(i\nu_l)^2 - \omega_0(\mathbf{k})^2}$$

一方. exact Green関数 $D(\mathbf{k}, i\nu_l)$ は Linked cluster theorem を使うと.

(23) $$D[\mathbb{k}, i\nu_\ell] = \int_0^\beta du \langle T(U(\beta)\phi_{\mathbb{k}}(u)\phi_{-\mathbb{k}}(0))\rangle_{0L}\, e^{i\nu_\ell u}$$

と変形される。$\langle \cdots \rangle_{0L}$ は $e^{-\beta H_0}$ で温度平均をとり、かつ linked した diagram のみを集めることを意味する。また

(24) $$U(\beta) = T \exp\left(-\int_0^\beta H_1(u)\,du\right).$$

(23)式の 0 次は

$$D_0(\mathbb{k}, i\nu_\ell) = \int_0^\beta du \langle \phi_{\mathbb{k}}(u)\phi^+_{\mathbb{k}}(0)\rangle_0\, e^{i\nu_\ell u} = \frac{-2\omega_0(\mathbb{k})}{(i\nu_\ell)^2 - \omega_0(\mathbb{k})^2}$$

で free propagator を得る。1 次は

$$D_1(\mathbb{k}, i\nu_\ell) = \int_0^\beta du\, e^{i\nu_\ell u} \langle T(-1)\int_0^\beta du_1 \sum_{\mathbb{k}'}^{1.B.Z} I(\mathbb{k}'+\mathbb{g}, \mathbb{k}')\phi_{\mathbb{k}'+\mathbb{g}}(u_1)\phi^+_{\mathbb{k}'}(u_1)$$
$$\times \phi_{\mathbb{k}}(u)\phi^+_{\mathbb{k}}(0)\rangle_0 = 0$$

$\vec{g} = 0$ 以外には取り得ないので寄与は零、同様に奇数次からの寄与はない。2 次は

$$D_2(\mathbb{k}, i\nu_\ell) = D_0(\mathbb{k}, i\nu_\ell)(-I(\mathbb{k}, \mathbb{k}+\mathbb{g}))\, D_0(\mathbb{k}+\mathbb{g}, i\nu_\ell)(-I(\mathbb{k}+\mathbb{g}, \mathbb{k}))$$
$$\times D_0(\mathbb{k}, i\nu_\ell)$$

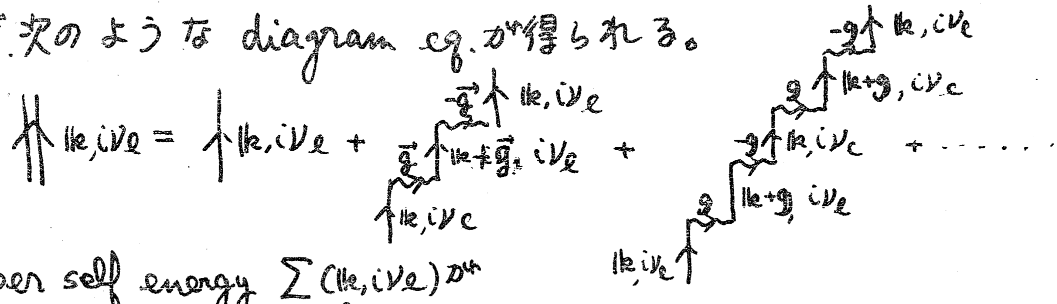
$$\vdots$$

ここで次のように diagram を定義する

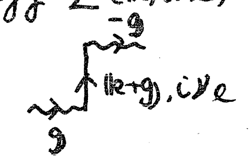
(25) $$D(\mathbb{k}, i\nu_\ell) \equiv \Uparrow \mathbb{k}, i\nu_\ell, \qquad D_0(\mathbb{k}, i\nu_\ell) \equiv \uparrow \mathbb{k}, i\nu_\ell$$

$$-I(\mathbb{k}+\mathbb{g}, \mathbb{k}) \equiv \overset{\mathbb{g}}{\rightsquigarrow}$$

ならば次のような diagram eq. が得られる。

(26) 


proper self energy $\Sigma(\mathbb{k}, i\nu_\ell)$ が

(27) $\Sigma(\mathbb{k}, i\nu_\ell) =$  $= I(\mathbb{k}+\mathbb{g}, \mathbb{k})\, D_0(\mathbb{k}+\mathbb{g}, i\nu_\ell)\, I(\mathbb{k}, \mathbb{k}+\mathbb{g})$

で与えられることに注意すると Dyson eq. を得る。

(28) $$D(\mathbb{k},i\nu_l)=D_0(\mathbb{k},i\nu_l)+D_0(\mathbb{k},i\nu_l)\sum(\mathbb{k},i\nu_l)D(\mathbb{k},i\nu_l).$$

故に (16), (22) 式を使うと.

(29) $$D(\mathbb{k},i\nu_l)=\frac{1}{D_0(\mathbb{k},i\nu_l)^{-1}-I(\mathbb{k}+\mathbb{g},\mathbb{k})^2D_0(\mathbb{k}+\mathbb{g},i\nu_l)}$$
$$=\frac{-2\omega_0(\mathbb{k})\left[(i\nu_l)^2-\omega_0(\mathbb{k}+\mathbb{g})^2\right]}{((i\nu_l)^2-\omega_0^2(\mathbb{k}))((i\nu_l)^2-\omega_0^2(\mathbb{k}+\mathbb{g}))-Q^2(\omega(\mathbb{k}+\mathbb{g})\omega(\mathbb{k}))^2}.$$

(30)
$$\omega_0^2(\mathbb{k})=\frac{m+M}{mM}\left[\gamma_1(1-\cos k_1)+\gamma_2(1-\cos k_2)+\gamma_3(1-\cos k_3)\right]$$
$$\omega_0^2(\mathbb{k}+\mathbb{g})=\frac{m+M}{mM}\left[\gamma_1(1+\cos k_1)+\gamma_2(1+\cos k_2)+\gamma_3(1+\cos k_3)\right]$$

に注意すると(29)式の pole は

(31) $$\left[(i\nu_l)^2\right]^2-\frac{2(m+M)}{mM}(\gamma_1+\gamma_2+\gamma_3)(i\nu_l)^2+\frac{4}{mM}\left[(\gamma_1+\gamma_2+\gamma_3)^2-\left(\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\cos k_i\right)^2\right]=0$$

で与えられる。したがって

(32) $$(i\nu_l)^2=\omega^2=\frac{1}{mM}\left[(m+M)(\gamma_1+\gamma_2+\gamma_3)\pm\sqrt{(m-M)^2(\gamma_1+\gamma_2+\gamma_3)^2+4mM\left(\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\cos k_i\right)^2}\right].$$

$\mathbb{k}=(k_1,k_2,k_3)$ に対応する acoustical band (− sign) と optical band (+ sign) の振動数を各々 $\omega^-(\mathbb{k})^2$, $\omega^+(\mathbb{k})^2$ と表わすと, (29)式は

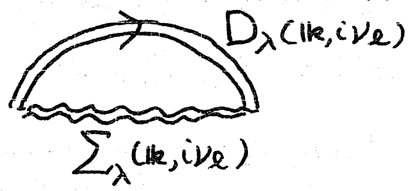
(33) $$D(\mathbb{k},i\nu_l)=\frac{-2\omega_0(\mathbb{k})\left[(i\nu_l)^2-\omega_0(\mathbb{k}+\mathbb{g})^2\right]}{\left[(i\nu_l)^2-\omega^-(\mathbb{k})^2\right]\left[(i\nu_l)^2-\omega^+(\mathbb{k})^2\right]}.$$

## §.4. 自由エネルギー

Free energy F を求めるには. unperturbed Free energy $F_0$ からの増分 $\Delta F$ を求めればよいが. Feynmann の定理から

(34) $$\Delta F=\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\langle H'(\lambda)\rangle_\lambda$$

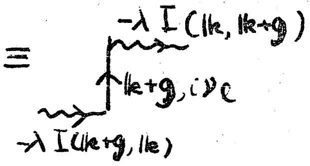
で与えられる。ここで $H'(\lambda)=\lambda H'$, $H(\lambda)=H_0+\lambda H'$ なる linear parameter $\lambda$ を含んでいる。また $\langle H_1(\lambda)\rangle_\lambda$ は

(35) $$\langle H_1(\lambda)\rangle_\lambda = -\frac{1}{\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\mathrm{1.B.Z.}}\sum_{\ell}$$



で与えられる。また

(36) $$D_\lambda(\mathbb{k},i\nu_\ell)=\frac{D_0(\mathbb{k},i\nu_\ell)}{1-\Sigma_\lambda(\mathbb{k},i\nu_\ell)D_0(\mathbb{k},i\nu_\ell)}\,.$$

proper self-energy $\Sigma_\lambda(\mathbb{k},i\nu_\ell)$ は今の場合

(37) $$\Sigma_\lambda(\mathbb{k},i\nu_\ell)\equiv$$


$$=(\lambda I(\mathbb{k}+\mathbb{g},\mathbb{k}))^2 D_0(\mathbb{k}+\mathbb{g}, i\nu_\ell)\,.$$

したがって (34)式は

(38) $$\begin{aligned}\Delta F &= -\frac{1}{\beta}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\sum_{\mathbb{k}}^{\mathrm{1.B.Z.}}\sum_{\ell}\frac{D_0(\mathbb{k},i\nu_\ell)\Sigma_\lambda(\mathbb{k},i\nu_\ell)}{1-\Sigma_\lambda(\mathbb{k},i\nu_\ell)D_0(\mathbb{k},i\nu_\ell)}\\
&= -\frac{1}{\beta}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\sum_{\mathbb{k}}^{\mathrm{1.B.Z.}}\sum_{\ell}\frac{(\lambda I(\mathbb{k}+\mathbb{g},\mathbb{k}))^2 D_0(\mathbb{k}+\mathbb{g},i\nu_\ell)D_0(\mathbb{k},i\nu_\ell)}{1-(\lambda I(\mathbb{k}+\mathbb{g},\mathbb{k}))^2 D_0(\mathbb{k}+\mathbb{g},i\nu_\ell)D_0(\mathbb{k},i\nu_\ell)}\\
&= \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\mathrm{1.B.Z.}}\sum_{\ell}\ln\left|\frac{D^{-1}(\mathbb{k},i\nu_\ell)}{D_0^{-1}(\mathbb{k},i\nu_\ell)}\right|\\
&= \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\mathrm{1.B.Z.}}\sum_{\ell}\ln\left|\frac{((i\nu_\ell)^2-\omega^+(\mathbb{k})^2)((i\nu_\ell)^2-\omega^-(\mathbb{k})^2)}{((i\nu_\ell)^2-\omega_0(\mathbb{k})^2)((i\nu_\ell)^2-\omega_0(\mathbb{k})^2)}\right|.\end{aligned}$$

ここで良く知られた公式

(39) $$\frac{1}{\beta}\sum_{\ell}f(i\nu_\ell) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{\text{実軸}} f(z)\frac{dz}{e^{\beta z}-1}$$

$$\nu_\ell=\frac{2\pi\ell}{\beta}\qquad \ell=0,\pm1,\cdots\cdots$$

を使うと $\Delta F$ は、

(40) $$\Delta F = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbb{k}}^{\text{1.B.Z.}} \frac{1}{2\pi i}\int_{\leftrightarrows} \frac{dz}{e^{\beta z}-1}\ln\left|\frac{(z^2-\omega^+(\mathbb{k})^2)(z^2-\omega^-(\mathbb{k})^2)}{(z^2-\omega_0(\mathbb{k})^2)(z^2-\omega_0(\mathbb{k}+\mathbb{g}))}\right|,$$

一度部分積分をしておいて.実軸上のpole計算を行うと

(41) $$\Delta F = \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\text{1.B.Z.}} \ln\left|(1-e^{-\beta\omega^+(\mathbb{k})})(1-e^{+\beta\omega^+(\mathbb{k})})(1-e^{-\beta\omega^-(\mathbb{k})}) \times (1-e^{+\beta\omega^-(\mathbb{k})})\right|$$
$$-\frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\text{1.B.Z.}} \ln\left|(1-e^{-\beta\omega_0(\mathbb{k})})(1-e^{+\beta\omega_0(\mathbb{k})})(1-e^{-\beta\omega_0(\mathbb{k}+\mathbb{g})})(1-e^{+\beta\omega_0(\mathbb{k}+\mathbb{g})})\right|,$$
$$= \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\text{1.B.Z.}} (\beta\omega^+(\mathbb{k})+2\ln|1-e^{-\beta\omega^+(\mathbb{k})}|)+(\beta\omega^-(\mathbb{k})+2\ln|1-e^{-\beta\omega^-(\mathbb{k})}|)$$
$$-\frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbb{k}}^{\text{1.2.B.Z.}} (\beta\omega_0(\mathbb{k})+2\ln|1-e^{-\beta\omega_0(\mathbb{k})}|),$$

第二項目は明らかに $H_0$ system の free energy $F_0$ である から全系の Free energy は(41)式の第一項

(42) $$F = kT\sum_{\mathbb{k}}^{\text{1.B.Z.}} \left(\frac{\omega^+(\mathbb{k})}{2kT}+\ln|1-e^{-\beta\omega^+(\mathbb{k})}|\right) + \left(\frac{\omega^-(\mathbb{k})}{2kT}+\ln|1-e^{-\beta\omega^-(\mathbb{k})}|\right).$$

また平均エネルギーは

(43) $$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}(-\beta F) = \sum_{\mathbb{k}}\omega^+(\mathbb{k})\left[\frac{1}{e^{\beta\omega(\mathbb{k})^+}-1}+\frac{1}{2}\right] + \omega^-(\mathbb{k})\left[\frac{1}{e^{\beta\omega(\mathbb{k})^-}-1}+\frac{1}{2}\right]$$

となって.良く知られた結果を得る。

## 参照文献

1. R. D. Mattuck, Ann. Phys. 27 No 2 (1964)
2. J. M. Luttinger & J. C. Ward, Phys. Rev. 118, No 5 (1960) p 1418.
3. T. D. Schultz, Quantum Field Theory and the Many-Body Problem, Gordon and Breach, New York (1964) p. 75 ~ 79.
4. A. A. Maradudin, G. H. Weiss, D. W. Jepsen, J. Math. Phys. 2 No 3 (1961) p 349, Appendix D.