

氏名	中 村 充 伸 なか むら みつ のぶ
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	理 博 第 215 号
学位授与の日付	昭 和 46 年 5 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	理 学 研 究 科 物 理 学 第 一 専 攻
学位論文題目	不規則系におけるグリーン関数法 — 強磁場中の半導体及び 3 次元不規則格子への応用 —
論文調査委員	(主 査) 教 授 松 原 武 生 教 授 富 田 和 久 教 授 松 田 博 嗣

論 文 内 容 の 要 旨

物性物理学の重要な研究課題の一つとして、不純物半導体、混晶、合金、液体金属等の物質の呈する不規則性の統計処理の問題があげられ、最近10年間に大きい発展を見た。そのような系の物理量に一定の意味を与えるには、原子配置の不規則性すなわち可能な配置すべてを含む母集団に関する平均操作が必要であり、それを系のグリーン関数に対して行なう方法は「不規則系のグリーン関数法」と呼ばれている。不規則系のグリーン関数の粒子に対する散乱とみなして展開し、散乱体の個数に応じて一体散乱、二体散乱のように系統的に処理する手段の確立が望まれるが、その最低次の手段については”Coherent Potentialの方法”が世界的に受け入れられるに至った。二体散乱以上の取扱いについては Yonezawa が原理的に正しい手法を導いているが、それを具体的に実行することは一般的に非常に複雑な計算を必要とするものであって、未だ実行された例はなかった。そこで、申請者は、二体散乱すべてを含む二次の統計処理計算を次の二例について具体的に遂行した：

- (1) 強磁場中におかれた半導体の電子不純物帯
- (2) 立方格子二元不規則合金の格子振動スペクトル

第一の例は半導体が濃度 10^{14}cm^{-3} 程度の不純物によって乱されて、理想的な完全結晶の場合に成立する電子エネルギー帯が二つに分離していわゆる不純物帯を形成する可能性を調べ、さらに二体以上の散乱によって帯の状態密度に tail が現われる現象を具体的な数値計算に基づいて追求するものである。強磁場の作用を仮定するのは、それによって不純物帯形成が強められることが実験的に確かめられていること、および理論上三次元の問題が一次元問題に単純化することの利点があるからである。申請者は上述のプログラムを二体散乱の範囲まで正しく取り入れて実行した。その際不純物濃度の低いことおよびポテンシャル強度の弱いことの条件のため、他の不規則系で重要視されていた「排除効果」が今の場合特に問題にならぬことを確認している。しかし、その代償として非常に遠距離の不純物対まで考慮する必要があることを見出し、それが長い tail が現われる原因となっていることを数値計算の結果として示した。

第二の例は三次元結晶の二元合金の格子振動スペクトルに関するものであり、1967年発表された一体散乱の範囲での Taylor の結果を再吟味しようとするものである。不規則合金の格子振動のスペクトルについては、以前から不純物のクラスターが生ずるスペクトルの微細構造が問題とされていて、そのグリーン関数法による記述が興味の焦点であった。Taylor はその一体散乱の取扱いにおいて微細構造の一部が現われるとしたのであるが、計算の基礎になる完全結晶スペクトルの選び方に問題があるので、その結果に疑問が抱かれていた。申請者はまずこの点を調べ、正しい取扱いでは一体散乱の範囲で微細構造は現われず、従ってそれは二体以上の散乱効果にもとづくものであることを示した。次に「排除効果」を考慮する厳密な二体散乱の公式を数値的に求めて、計算機実験で得られている構造にほぼ対応するような微細構造を見出している。

申請者は、以上の二例の結果を比較検討し、二次の揺動効果が一方では帯の tail を生じ、他方ではある種の微細構造を形成することが、ポテンシャルの強度および「排除効果」の重要度によって左右され、二つの例がそれぞれの典型になっていると主張している。

論文審査の結果の要旨

グリーン関数法による不規則系の研究は、最近いわゆる "Coherent Potential 近似" (以下 CPA と略記) と呼ばれる方法が確立されて、世界的に非常に盛になったものの一つであるが、その研究の大部分は CPA を具体的な問題へ応用するための改良および CPA に基づいて種々の不規則系の物性を計算することにむけられてきた。しかし、CPA は、異なる位置にある二個以上の不純物からの散乱の干渉効果をすべて無視した近似であるから、おのずからその適用範囲に制限があるはずであり、近い将来に CPA からのはずれが問題とされるようになるのは必然だと思われる。ところで CPA 以上の高次の近似を考慮した研究は今までに殆んどなく、現在原理的に正しくて系統的方法と見られているのは Yonezawa による一般理論であるだけである。しかし、Yonezawa の理論を具体的な問題に適用することは、一般に非常に複雑な計算を必要とするので、今までに実行される機会がなかった。

申請者はこの労の多い難問に取り組む、二つの具体的な例について詳細な数値計算を遂行した。この申請者の研究で高く評価される点は、第一に困難な数値計算を実行する過程において多くの創意にみちた技術を開発して計算所要時間の短縮を可能にさせ、今後この種の計算を実行する際の有用な参考例を提供している点、および第二に計算の結果はじめて判明したいくつかの事実によって CPA の方法ならびに CPA 以上の近似に関する重要な新しい知見をつけ加えた点である。二体散乱すべてを含む取扱いを self-consistent 法で遂行する際現われる最大の困難は、CPA の有効ポテンシャルに相当するものがエネルギーと波数ベクトルの両方に依存し、しかも、それをつじつまが合うようにきめる方程式の中に波数ベクトルについての積分が含まれていることである。申請者はこの困難な点を巧みに回避して収束の速い計算法を案出しており、この種の計算が実行可能であることを示した。また二つの具体例で得られた計算結果では、強磁場中の不純物半導体の場合、CPA の方法では現われなかった電子エネルギー帯の長い tail が、不純物の対の影響を考慮することによって現われることを明快に示している。三次元結晶の二元合金の格子振動スペクトルに対する数値計算の結果では、従来 CPA の方法がスペクトルの微細構造の一部をも再現で

きるすぐれた近似であるかのような印象を与えていた Taylor の数値計算の結果は，そのまま認めることは誤であり，スペクトルの微細構造は CPA 以上の近似ではじめて現われるものであることを申請者の新しい数値計算の結果は示している。以上二点の指摘は現在不規則系の問題において専ら用いられている CPA の方法が適用限界をもつことを，簡単な例について端的に示した重要な知見であって，今後の研究に益する点が少なくない。

これを要するに，本論文の研究は物性物理学，特に不規則系の基礎物性の研究分野に重要な知見を加えたものと云うことができる。参考論文はいずれも申請者の固体物理学・統計物理学における高い学識と研究能力を示している。

よって，本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。