

# 格子場内の一電子波動函数 (II)

広 田 徹 (芝浦工大)

(11月5日受理)

## § 1 序

前に発表した積分方程式の iteration 級数より多数のポテンシャル中心場内の一電子波動函数を取扱う方法<sup>1)</sup>を、 $\delta$  函数ポテンシャルより一次元一般ポテンシャルの場合へと拡張する。周期場、不純物のある周期場及び非周期場中の波動函数を求めるが、非周期場の取扱いは、近似の意味などについて、 $\delta$  函数ポテンシャルの場合と共に次に検討、報告するつもりである。

周期場及不純物のある周期場については、iteration の級数を全部足し合わせる事が出来、又一般的な K.P. relation が得られる。

非周期場については、ポテンシャル中心の分布についての二体分布函数により、波動函数が近似的に表現出来る。

## § 2 表 現

一次元の Schrödinger 方程式の、Volterra 型積分方程式による表現は

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int_0^x \frac{\sin k(x-\xi)}{k} V(\xi) \psi(\xi) d\xi \quad (1)$$

となる。但し  $\psi_0(x)$  は  $V=0$  の時の解であり

$$\psi_0(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (2)$$

を表わす。上で、 $k$  及び  $V$  は

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad V(x) = \sum_1 \frac{2m}{\hbar^2} U(x-x_1) \quad (3)$$

であり、 $\sum U(x-x_1)$  は各ポテンシャル中心からの寄与を示す。

iteration により、(1)の解は

$$\psi(x) = \psi_0(x) \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^x d\xi_1 \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \dots \int_0^{\xi_{n-1}} d\xi_n \frac{\sin k(x-\xi_1)}{k} V(\xi_1) \times \frac{\sin k(\xi_1-\xi_2)}{k} V(\xi_2) \dots \frac{\sin k(\xi_{n-1}-\xi_n)}{k} V(\xi_n) \psi_0(\xi_n) \quad (4)$$

と書く事が出来る。

ポテンシャル  $V(x)$  として次のものをとる。

“同じ形、大きさをもつたポテンシャルが一直線上に分布している。がポテンシャル中心間の距離は自由” とする。即ち square barrier potential であれば、山の高さ、幅は共通で、間隔は自由と考える。

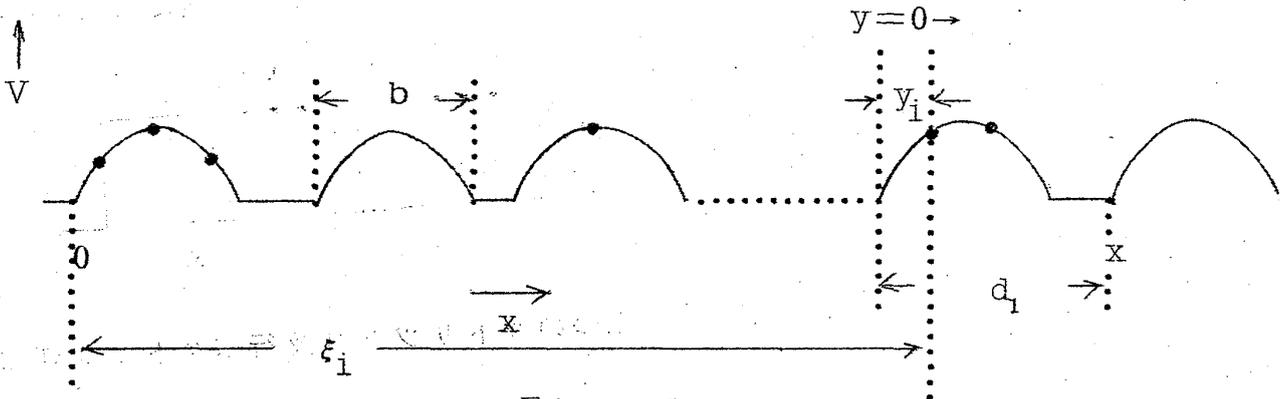


Fig. 1

iteration の級数に於て、積分点  $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$  が同じポテンシャルの中にあるものと、異つたポテンシャルの中にあるものを分けて考える。又(1)の  $i$  番目のポテンシャルと  $i+1$  番目のポテンシャルとの間隔を  $d_{i+1}$  とし、 $\xi$  座標の代りに次式で定義される  $y$  座標を使用する。

$$y_i - y_{i+1} + d_{i+1} \equiv \xi_i - \xi_{i+1} \quad (5)$$

これはポテンシャル中心に関する座標である。すると(1)は、

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^b dy_1 \int_0^b dy_2 \dots \int_0^b dy_n \frac{\sin k(d_1 - y_1)}{k} V(y_1) \times \sum_{t=0}^{\infty} \int_0^{y_1^{(1)}} dy_1^{(1)} \int_0^{y_1^{(1)}} dy_1^{(2)} \dots \int_0^{y_1^{(t-1)}} dy_1^{(t)} \frac{\sin k(y_1 - y_1^{(1)})}{k} V(y_1^{(1)}) \frac{\sin k(y_1^{(1)} - y_1^{(2)})}{k} \times V(y_1^{(2)}) \dots \frac{\sin k(y_1^{(t-1)} - y_1^{(t)})}{k} V(y_1^{(t)}) \times \frac{\sin k(d_2 + y_1^{(t)} - y_2)}{k} \quad (6)$$

広田 徹

$$\begin{aligned} & \times V(y_2) \dots \frac{\sin k(d_n + y_{n-1}^{(i)} - y_n)}{k} V(y_n) \sum_{r=0}^{\infty} \int_0^{y_n} dy_n^{(1)} \int_0^{y_n^{(1)}} dy_n^{(2)} \\ & \dots \int_0^{y_n^{(r-1)}} dy_n^{(r)} \frac{\sin k(y_n - y_n^{(1)})}{k} V(y_n^{(1)}) \frac{\sin k(y_n^{(1)} - y_n^{(2)})}{k} V(y_n^{(2)}) \dots \\ & \dots \frac{\sin k(y_n^{(r-1)} - y_n^{(r)})}{k} V(y_n^{(r)}) \psi_0(d_{n+1} + y_n^{(r)}) \end{aligned}$$

となる。 $\sum_{t=0}^{\infty} f-f$  及  $\sum_{r=0}^{\infty} f-f$  は各々一つのポテンシャルについての寄與を示す。積分点が一箇の場合，二箇，三箇……の場合があるわけである。肩に添字のついていない  $y_1, y_2 \dots y_n$  は異つたポテンシャル内に位置している。square barrier の場合に一つを図示すると Fig. 2 の様になる。

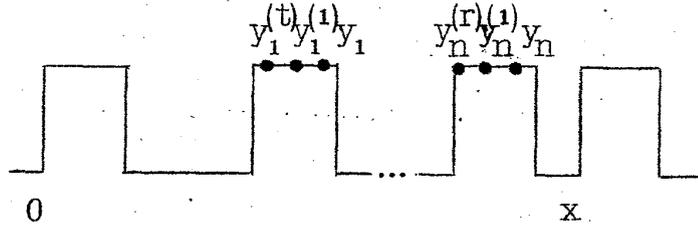


Fig. 2

ここで次式により、二つのマトリックス及行ベクトル，列ベクトルを定義する。

$$T(d) \equiv \begin{pmatrix} \cos kd & \sin kd \\ \sin kd & -\cos kd \end{pmatrix} \quad S \equiv \begin{pmatrix} I_{CS} & I_{CC} \\ I_{SS} & I_{SC} \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\bar{T} \equiv (0, 1), \quad \underline{T} \equiv \begin{pmatrix} -A \sin kd + B \cos kd \\ A \cos kd + B \sin kd \end{pmatrix}$$

但し

$$\begin{aligned} I_{CS} &= \int_0^b dy_1 \int_0^{y_1} dy_2 \cos ky_1 K(y_1, y_2) \sin ky_2 \\ I_{SC} &= \int_0^b dy_1 \int_0^{y_1} dy_2 \sin ky_1 K(y_1, y_2) \cos ky_2 \\ I_{CC} &= \int_0^b dy_1 \int_0^{y_1} dy_2 \cos ky_1 K(y_1, y_2) \cos ky_2 \\ I_{SS} &= \int_0^b dy_1 \int_0^{y_1} dy_2 \sin ky_1 K(y_1, y_2) \sin ky_2 \end{aligned} \quad (8)$$

$$K(y_1, y_2) \equiv \frac{V(y_1)}{k} \delta(y_1 - y_2) + \sum_{t=0}^{\infty} \int_{y_2}^{y_1} dy^{(1)} \int_{y_2}^{y^{(1)}} dy^{(2)} \dots \int_{y_2}^{y^{(t-1)}} dy^{(t)} \quad (9)$$

$$\times \frac{V(y_1)}{k} \frac{\sin k(y_1 - y^{(1)})}{k} V(y^{(1)}) \dots \frac{\sin k(y^{(t)} - y_2)}{k} V(y_2)$$

これらのマトリックス及ベクトルにより(6)は

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{d_1+d_2+\dots+d_{n+1}=x} \bar{T} T(d_1) S T(d_2) S \dots T(d_n) S \underline{T}(d_{n+1}) \quad (10)$$

とまとめる事が出来る。ここでも1ポテンシャル中心の分布が与えられると、母函数の方法で(10)の級数和を求めることが出来る。

### § 3 周期格子

ポテンシャル中心間の距離が一定(=a)の周期格子を考えよう。この時  $d_1 = N_1 a$  と書くならば

$$T(N_1) = \begin{pmatrix} \cos k N_1 a, & \sin k N_1 a \\ \sin k N_1 a, & -\cos k N_1 a \end{pmatrix} \quad (11)$$

であるので、これに対する母函数マトリックス  $T_0(Z)$  を定義する。

$$T_0(Z) = \begin{pmatrix} \sum_{N_1=1}^{\infty} \cos k N_1 a, Z^{N_1}, & \sum_{N_1=1}^{\infty} \sin k N_1 a, Z^{N_1} \\ \sum_{N_1=1}^{\infty} \sin k N_1 a, Z^{N_1}, & \sum_{N_1=1}^{\infty} \cos k N_1 a, Z^{N_1} \end{pmatrix} \quad (12)$$

すると級数和(10)に於ける条件  $d_1 + d_2 + \dots + d_{N-1} = x$  は  $N_1 + N_2 + \dots + N_{N-1} = N$  と代り、 $T_0$  を  $T$  の位置に置いた時  $Z^N$  の係数が  $\psi(x)$  を与えることになる。

$T_0(Z)$  より更に

$$T_0(Z) = \frac{Z}{Z^2 - 2 \cos k a Z + 1} \begin{pmatrix} \cos k a - Z, & \sin k a \\ \sin k a, & -(\cos k a - Z) \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\equiv \frac{Z}{Z^2 - 2 \cos k a Z + 1} T'_0$$

によつて  $T'_0$  を定義すると

広田 徹

$$\psi(x) = \psi(Na) = \oint \frac{dZ}{Z^{N+1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{Z^n}{(Z^2 - 2\cos ka Z + 1)^n} \bar{T} T'_0 S T'_0 S \dots \quad (14)$$

$$\dots T'_0 S T'_0 \quad \text{但} \quad \underline{T}_0 = \begin{pmatrix} -A \sum_{N_1=0}^{\infty} \sin k N_1 a Z^{N_1} + B \sum_{N_1=0}^{\infty} \cos k N_1 a Z^{N_1} \\ A \sum_{N_1=0}^{\infty} \cos k N_1 a Z^{N_1} + B \sum_{N_1=0}^{\infty} \sin k N_1 a Z^{N_1} \end{pmatrix}$$

と表わせる。次に  $T'_0 S \equiv M$  とし  $M$  をユニタリー変換で対角化する。

$$T'_0 S \equiv M, \quad Y^{-1} M Y = M_0, \quad M_0 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (15)$$

とすると

$$\bar{T} T'_0 S \dots S T'_0 = \bar{T} Y M_0^n Y^{-1} T_0 = p \lambda_1^n + q \lambda_2^n \quad (16)$$

の形になる故 (14) に於ける被積分項の級数和が求められる。  $q, p$  は  $Z$  の関数である。

$$M = T'_0 S = \begin{pmatrix} (\cos ka - Z) I_{CS} + \sin ka I_{SS}, & (\cos ka - Z) I_{CC} + \sin ka I_{SC} \\ -(\cos ka - Z) I_{SS} + \sin ka I_{CS}, & -(\cos ka - Z) I_{SC} + \sin ka I_{CC} \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$\left. \begin{matrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \{ M_{11} + M_{22} \pm \sqrt{(M_{11} - M_{22})^2 + 4M_{12}M_{21}} \} \quad (18)$$

$$Y = \frac{1}{M_{12}} \begin{pmatrix} M_{12} & M_{12} \\ \lambda_1 - M_{11} & \lambda_2 - M_{11} \end{pmatrix}, \quad Y^{-1} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \begin{pmatrix} \lambda_2 - M_{11} & -M_{12} \\ -(\lambda_1 - M_{11}) & M_{12} \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$\bar{T} Y = \frac{1}{M_{12}} (\lambda_1 - M_{11}, \lambda_2 - M_{11}) \quad (20)$$

$$Y^{-1} T_0 = \frac{1}{(\lambda_2 - \lambda_1)(Z^2 - 2\cos ka Z + 1)} \times \begin{pmatrix} (\lambda_2 - M_{11}) \{ -AZ \sin ka + B(1 - Z \cos ka) \} - M_{12} \{ A(1 - Z \cos ka) \\ + BZ \sin ka \} \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$\left[ \begin{aligned} & -(\lambda_1 - M_{11}) \{-AZ \sin ka + B(1 - Z \cos ka)\} + M_{12} \{A(1 - \cos ka) \\ & \qquad \qquad \qquad + BZ \sin ka\}, \end{aligned} \right]$$

これらを使つて計算すると(14)の級数和は

$$\begin{aligned} & \frac{(\lambda_1 - M_{11})(\lambda_2 - M_{22})}{M_{12}(\lambda_2 - \lambda_1)} \left[ A \left\{ \frac{1}{Z^2 - 2 \cos ka Z + 1 - Z \lambda_1} (-Z \sin ka - \frac{M_{12}(1 - Z \cos ka)}{\lambda_2 - M_{11}}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{1}{Z^2 - 2 \cos ka Z + 1 - Z \lambda_2} (Z \sin ka + \frac{M_{12}(1 - Z \cos ka)}{\lambda_1 - M_{11}}) \right\} \right] \quad (22) \\ & + B \left\{ \frac{1}{Z^2 - 2 \cos ka Z + 1 - Z \lambda_1} ((1 - Z \cos ka) - \frac{M_{12} Z \sin ka}{\lambda_2 - M_{11}}) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{Z^2 - 2 \cos ka Z - 1 - Z \lambda_2} (- (1 - Z \cos ka) + \frac{M_{12} \sin ka}{\lambda_1 - M_{11}}) \right\} \end{aligned}$$

となる。共通分母にして求めていくと、

$$\begin{aligned} & (Z^2 - 2 \cos ka Z + 1 - Z \lambda_1)(Z^2 - 2 \cos ka Z + 1 - Z \lambda_2) \\ & = (Z^2 - 2 \cos ka Z + 1 - Z \frac{1}{2}(M_{11} - M_{22})^2 + M_{12} M_{21}) \end{aligned}$$

Mの値を入れ計算すると

$$\begin{aligned} & = (Z^2 - 2 \cos ka Z + 1) \{ Z^2 [1 + I_{CS} - I_{SC} + I_{SC} I_{CS} - I_{CC} I_{SS}] \\ & \quad - Z [2 \cos ka + \cos ka (I_{CS} - I_{SC}) + \sin ka (I_{SS} + I_{CC})] + 1 \} \quad (23) \end{aligned}$$

Aの項の分子は計算の結果

$$(\lambda_2 - \lambda_1)(Z^2 - 2 \cos ka Z + 1) \{ 1 - Z (\cos ka + \sin ka I_{SS} + \cos ka I_{CS}) \} M_{12} \quad (24)$$

となり、Bの項の分子は

$$(\lambda_2 - \lambda_1)(Z^2 - 2 \cos ka Z + 1) \{ Z (\sin ka - \cos ka I_{SS} - \sin ka I_{CS}) \} M_{12} \quad (25)$$

となり、最終的に

広田 徹

$$\text{級数和} = \frac{A\{1 - Z(\cos ka(1 + I_{CS}) + \sin ka I_{SS})\} + BZ\{\sin ka(1 - I_{CS}) - \cos ka I_{SC}\}}{Z^2(1 + I_{CS} - I_{SC} + I_{SC} I_{CS} - I_{SS} I_{CC}) - 2Z\{\cos ka(1 + \frac{1}{2}(I_{CS} - I_{SC}))\} + \frac{1}{2}\sin ka(I_{SS} + I_{CC})\} + 1} \quad (26)$$

これを

$$= A \frac{1 - hZ}{1 - 2fZ + cZ^2} + B \frac{gZ}{1 - 2fZ + cZ^2} \quad (27)$$

但

$$\begin{aligned} c &\equiv 1 + I_{CS} - I_{SC} + I_{SC} I_{CS} - I_{SS} I_{CC} \\ f &\equiv \cos ka \left\{ 1 + \frac{1}{2} (I_{CS} - I_{SC}) \right\} + \frac{1}{2} \sin ka (I_{SS} + I_{CC}) \\ g &\equiv \sin ka (1 - I_{CS}) - \cos ka I_{SC} \\ h &\equiv \cos ka (1 + I_{CS}) + \sin ka I_{SS} \end{aligned} \quad (28)$$

と書くと、(27)をZで展開した時  $Z^N$  の値が  $\psi$  を与える事になる。直ちに

$$\begin{aligned} \psi(Na) = A &\left\{ \frac{\sin(N+1)\theta}{\sin\theta} \frac{h}{c^{\frac{N+1}{2}}} - \frac{\sin N\theta}{\sin\theta} \frac{h}{c^{\frac{N}{2}}} \right. \\ &+ B \frac{\sin N\theta}{\sin\theta} \frac{g}{c^{\frac{N}{2}}} \end{aligned} \quad (29)$$

$$\text{但} \quad \cos\theta \equiv \frac{f}{\sqrt{c}} \quad (30)$$

の様を得られる。AとBのとり方により、N乗のみの項、-N乗のみの項が夫々残ることになる。cはrealであるから、Bloch waveが生ずる為には  $c = 1$  でなければならない。これは後で示そう。 $c = 1$ の時

$$\cos\theta = \cos\alpha a = \cos ka \left\{ 1 + \frac{1}{2} (I_{CS} - I_{SC}) \right\} + \frac{1}{2} \sin ka (I_{SS} + I_{CC}) \quad (31)$$

となり、 $\alpha$ はBloch waveの波数となる。これは一般的なK.P. relationといえる。

特殊なポテンシャルの場合に、この関係を試みよう。

(1)  $\delta$  函数ポテンシャル、 $V(x) = \kappa_0 \delta(x - x_1)$

この時  $I_{\infty} = \frac{\kappa_0}{k}$  ,  $I_{SS} = I_{CS} = I_{SC} = 0$  (32)

$$\cos a a = \cos ka + \frac{\kappa_0}{2k} \sin ka \quad c = 1$$

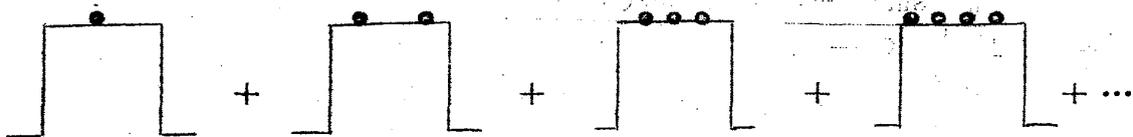
となる。これはよく知られた関係式である。

(2) 山(井戸)型ポテンシャル

山の高さ、 $V_0$ 、山の幅  $b$ 、谷の幅  $a - b$  とする。 $I$  の値は次の様にして求められる。先ず(9)で定義した  $K(y_1, y_2)$  を計算する。

$$K(y_1, y_2) = \frac{V_0}{k} \left[ \delta(y_1 - y_2) + \sum_{t=0}^{\infty} \left(\frac{V_0}{k}\right)^{S+1} \int_{y_2}^{y_1} dy^{(1)} \int_{y_2}^{y^{(1)}} dy^{(2)} \dots \int_{y_2}^{y^{(t-1)}} dy^{(t)} \right. \\ \left. \sin k(y_1 - y^{(1)}) \sin k(y^{(1)} - y^{(2)}) \dots \sin k(y^{(t)} - y_2) \right] \quad (9)$$

この各項を  $V_0$  について次数の少ないものから図に示すと Fig. 3



● : 積分点 Fig. 3

のように表わす事が出来る。

(9)の  $S+2$  次の項をとり、 $y_1 - y_2 = y$  とすると  
 $y^{(i)} - y_2 = y_1$

$$J_{S+2} \equiv \left(\frac{V_0}{k}\right)^{S+1} \int_0^y dy_1 \int_0^{y_1} dy_2 \dots \int_0^{y_{S-1}} dy_S \\ \times \sin k(y - y_1) \sin k(y_1 - y_2) \dots \sin k y_S \quad (33)$$

上式の Laplace 変換をとると

$$\int_0^{\infty} J_{S+2}(y) e^{py} dy = \left(\frac{V_0}{k}\right)^{S+1} \frac{k^{S+1}}{(p^2 + k^2)^{S+1}} \quad (34)$$

広田 徹

Sについて和をとり、逆変換を行なうと (p の real part は級数が収斂するようにとる。)

$$\begin{aligned} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{V_0 e^{ky}}{p^2+k^2-V_0} dP &= \frac{V_0}{\sqrt{k^2-V_0}} \sin \sqrt{k^2-V_0} y \\ &= \frac{V_0}{\sqrt{k^2-V_0}} \sin \sqrt{k^2-V_0} (y_1 - y_2) \end{aligned} \quad (35)$$

従つて

$$K(y_1, y_2) = \frac{V_0}{k} \left[ \delta(y_1 - y_2) + \frac{V_0}{\sqrt{k^2-V_0}} \sin \sqrt{k^2-V_0} (y_1 - y_2) \right] \quad (36)$$

となる。これにより

$$\begin{aligned} I_{SC} &= \frac{V_0}{2k} \left\{ \frac{1 - \cos(k+\beta)b}{k+\beta} + \frac{1 - \cos(k-\beta)b}{k-\beta} \right\} \\ I_{CS} &= \frac{V_0}{2\beta} \left\{ \frac{1 - \cos(k+\beta)b}{k+\beta} - \frac{1 - \cos(k-\beta)b}{k-\beta} \right\} \\ I_{SS} &= \frac{V_0}{2\beta} \left\{ \frac{\sin(k-\beta)b}{k-\beta} - \frac{\sin(k+\beta)b}{k+\beta} \right\} \\ I_{CC} &= \frac{V_0}{2k} \left\{ \frac{\sin(k-\beta)b}{k-\beta} + \frac{\sin(k+\beta)b}{k+\beta} \right\} \end{aligned} \quad (37)$$

$$\beta^2 \equiv k^2 - V_0$$

が得られ

$$\begin{aligned} c &= 1 + I_{CS} - I_{SC} + I_{SC} I_{CS} - I_{SS} I_{CC} = 1 \\ \cos aa &= \cos ka \left\{ 1 + \frac{1}{2} (I_{CS} - I_{SC}) \right\} + \frac{1}{2} \sin ka (I_{SS} + I_{CC}) \\ &= \cos ka \left( \frac{\beta^2 + k^2}{2k\beta} \sin \beta b \sin kb + \cos \beta b \cos kb \right) \\ &\quad + \sin ka \left( -\frac{\beta^2 + k^2}{2k\beta} \sin \beta b \cos kb + \cos \beta b \sin kb \right) \\ &= \cos k(a-b) \cos \beta b - \frac{k^2 + \beta^2}{2k\beta} \sin(a-b) \sin \beta b \end{aligned} \quad (38)$$

となる。これはよく知られた式である。

§ 4 不純物のある周期格子

ここでは簡単の為に、不純物として、ポテンシャルの山が一つだけ他の山と違う場合を考えよう。即ち(7)で定義したS行列が特定の格子点の上に於いてのみS'となる。不純物が更に多い場合、他の種類の不純物の存在の場合等に拡張して議論するのは左程困難ではない。さて

$$S' \equiv \begin{pmatrix} I'_{CS} & I'_{CC} \\ I'_{SS} & I'_{SC} \end{pmatrix} \quad (39)$$

を定義するならば、 $\psi(x) = \psi(Na)$  に対する式(10)に於てS'の入った項が生ずる事になる。S'が現れる場合 $S' = S + (S' - S)$ と置いてみる。Sと置いてみるとこれは不純物の無い場合の波動函数である。従つて(S'-S)の項より不純物の影響が生ずる。上の過程から明らかなように(S'-S)の入った項は積分点必ずポテンシャルの山に鎮座しているのであるから、不純物を境として(10)の条件付和を二つに分離出来る。これを見る為に

$$\begin{aligned} & \dots TST(S' - S)TST \dots \\ & = \dots TST \underline{T}_B (I'_{CS} - I_{CS}) \bar{T}TS \dots \\ & + \dots TST \underline{T}_B (I'_{CC} - I_{CC}) \bar{T}TS \dots \\ & + \dots TST \underline{T}_A (I'_{SC} - I_{SC}) \bar{T}TS \dots \\ & + \dots TST \underline{T}_B (I'_{SS} - I_{SS}) \bar{T}TS \dots \end{aligned} \quad (40)$$

と書き直してみる。

$$\text{但 } \bar{T} \equiv (1, 0), \quad \underline{T} \equiv (0, 1) \quad (41)$$

$\underline{T}_A, \underline{T}_B$  は(7)で定義した列ベクトルTの内、夫々A, Bの項を表わし

$$\begin{aligned} \underline{T}_A &= \begin{pmatrix} -\sin kd \\ \cos kd \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin kN_1 a \\ \cos kN_1 a \end{pmatrix} \\ \underline{T}_B &= \begin{pmatrix} \cos kd \\ \sin kd \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos kN_1 a \\ \sin kN_1 a \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (42)$$

広田 徹

で定義する。

さて、(40)に於て、様々な積分点の配置をとり、次に $n$ について $n=0$ より $n=\infty$ 迄総和する。これに不純物の無い時の波動函数を加えれば解になるのであるが、 $n$ は無限大迄走る事に注意すると、取扱いが簡単になる。即ち積分点の個数 $n$ 個は不純物の位置に一個、其他は不純物の左右に分けて配置される。この左右の個数は和は一定であるが夫々の個数は様々である。しかし $n$ は無限大迄走るので、不純物の左右の項の中の $n$ についての和は、各々独立に0から無限大迄走らせてよい。従つて左右の部分について夫々独立に母函数法を適用して計算出来る。結果及その手続を書くとき長くなるからここでは $\delta$ ポテンシャル

$$\begin{aligned} I_{\infty} &= \frac{\kappa_0}{k}, \quad I_{SS} = I_{CS} = I_{SC} = 0 \\ I'_{\infty} &= \frac{\kappa'}{k}, \quad I'_{SS} = I'_{CS} = I'_{SC} = 0 \end{aligned}$$

の場合だけを書くと、最終的に

$$\begin{aligned} \psi(Na) = & A \left[ \cos Naa + \frac{\kappa_0}{2k} \sin(N-m)aa \frac{\cos ka}{\sin aa} + \frac{\kappa' - \kappa_0}{\kappa_0} \frac{\sin maa}{\sin^2 aa} \sin^2 ka \right. \\ & \left. \left\{ \cos(N-m)aa + \frac{\kappa_0}{2k} \sin(N-m)aa \frac{\cos ka}{\sin aa} \right\} \right] \\ & + B \left[ \frac{\sin Naa}{\sin aa} \sin ka + \frac{\kappa' - \kappa_0}{\kappa_0} \frac{\sin maa}{\sin aa} \frac{\sin(n-m)aa}{\sin aa} \sin^2 ka \right] \end{aligned} \quad (43)$$

$$0 < m < N$$

但し、 $m$ は不純物の位置を示す。(境界条件により不純物レベルが決まることになる。)

#### § 4 非周期格子

次にポテンシャル中心が適当な分布をしている非周期格子を考える。前の論文では隣り合うポテンシャル中心の間隔が分布函数によつて与えられる場合を取扱つたが、母函数の方法に持込む方法に問題があつたように思われる。この方法を改良する手段も、いろいろ考えられるが、今回は二体分布函数で近似してみよう。多体分布函数で表現する事により近似を進めるが、形式論に終わらないようにするのは仲々むづかしい。

一つのポテンシャル中心の廻りの、もう一つのポテンシャル中心の分布が皆等しいと仮定しよう。これは、いささか乱暴な近似と考えられるが、液体が微

結晶の集団であるという見方からすれば、又液体内の波動函数が localize しているという見方からすると、第0近似として考えてもよいであろう。即ち或るポテンシャル中心から、 $x$ 離れた点に他の中心が来る割合が二体分布函数  $\rho^{(2)}(x)$  で与えられると仮定する。

すると  $T$  マトリックス

$$T(d) = \begin{pmatrix} \cos kd, & \sin kd \\ \sin kd, & -\cos kd \end{pmatrix}$$

に対する母函数マトリックスを

$$T_0(p) \equiv \begin{pmatrix} \int_0^{\infty} \cos kx \rho^{(2)}(x) e^{-xp} dx, & \int_0^{\infty} \sin kx \rho^{(2)}(x) e^{-xp} dx \\ \int_0^{\infty} \sin kx \rho^{(2)}(x) e^{-xp} dx, & -\int_0^{\infty} \cos kx \rho^{(2)}(x) e^{-xp} dx \end{pmatrix} \quad (44)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} T_C & T_S \\ T_S & -T_C \end{pmatrix}$$

と決める。又  $T$  に対する母函数を

$$\underline{T}_0(p) \equiv \begin{pmatrix} -AT_S + BT_C \\ AT_C + BT_S \end{pmatrix} \quad (45)$$

とする。対角化の過程に従い

$$Y^{-1} \underline{T}_0(p) = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \begin{pmatrix} (\lambda_2 - M_{11})(BT_C - AT_S) - M_{12}(BT_S + AT_C) \\ -(\lambda_1 - M_{11})(BT_C - AT_S) + M_{12}(BT_S + AT_C) \end{pmatrix} \quad (46)$$

$$\overline{TY} = \frac{1}{M_{12}} (\lambda_1 - M_{11}, \lambda_2 - M_{11}) \quad (47)$$

となる。 $M, Y$  は前と同様に

$$M \equiv T_0 S, \quad Y^{-1} M Y \equiv M_0 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (48)$$

で定義する。母函数マトリックスを使つて、iteration の級数を足し合せる

広田 徹

ので波動函数  $\psi(x)$  は、Laplace 逆変換により、座標が  $x$  の所を引き出し

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{0-i\infty}^{0+i\infty} \phi(p) e^{xp} dp \quad (49)$$

と得られる。  $\phi(p)$  は前節と同様の手続きに従い

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{(\lambda_1 - M_{11})(\lambda_2 - M_{11})}{(\lambda_2 - \lambda_1)M_{12}} \left[ A \left\{ \frac{-T_S(\lambda_2 - M_{11}) - M_{12}T_C}{(1 - \lambda_1)(\lambda_2 - M_{11})} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{T_S(\lambda_2 - M_{11}) + M_{12}T_C}{(1 - \lambda_2)(\lambda_1 - M_{11})} \right\} + B \left\{ \frac{T_C(\lambda_2 - M_{11}) - M_{12}T_S}{(1 - \lambda_1)(\lambda_2 - M_{11})} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{-T_C(\lambda_1 - M_{11}) + M_{12}T_S}{(1 - \lambda_2)(\lambda_1 - M_{11})} \right\} \right] \\ &= A \frac{M_{21}T_S + (1 - M_{11})T_C}{1 - (M_{11} + M_{22}) + M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21}} + B \frac{M_{21}T_C + (1 - M_{11})T_S}{1 - (M_{11} + M_{22}) + M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21}} \\ &= \frac{A \{ T_C + (T_S^2 - T_C^2) I_{CS} \} + B \{ T_S - (T_S^2 + T_C^2) I_{SS} \}}{1 - \{ T_C(I_{CS} - I_{SC}) + T_S(I_{SS} + I_{CC}) \} + (T_S^2 - T_C^2)(I_{SS}I_{CC} - I_{CS}I_{SC})} \quad (51) \end{aligned}$$

と波動函数の表現が得られる。

このように表現が得られたが、実際に計算していくのは仲々むづかしいように思われる。液体格子の場合ただいえる事はこのようにして得られる波動函数は  $\rho^{(2)}$  の性質よりわかるように、localize しているということである。何故ならば  $\rho^{(2)}$  の液体構造による変化は short range であるから  $x$  が大きい時  $\psi(x)$  には iteration の低次の項は入らないからである。このような process で Bloch wave の崩れた mode が正しく出るならば、これを iteration の 0 次近似として用い第一近似により、散乱による影響と合わせて或程度良い波動函数が得られるであろう。すると液体場の self-consistent な取扱いが出来るかも知れない。次の論文では非周期場を中心に議論していく積りである。

文 献

- 1) Toru Hirota 物性研究 2 (1964) 111, Private communication.