

Title	堀淳一氏より松田博嗣氏へ(海外だより)
Author(s)	堀, 淳一
Citation	物性研究 (1967), 8(5): 305-308
Issue Date	1967-08-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/86077
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

堀淳一氏より松田博嗣氏へ

非周期研究会のことなどくわしくおしらせいただき有難うございました。また、NaCl 型格子における Saxon - Hutner 型定理に関する私の “evaporation method” に対して早速貴重なコメントをいただき、まことに嬉しく存じました。戸田先生からもこれと等価でよりエレガントな考え方があるという御注意をいただき、有難く思っております。私も “evaporation” それ自身が本質的であると思っていたわけではなく、例えば “evaporate させる代りに “precipitate” させても (fix する) 全く同じ結論が得られますので、これが唯一の方法でないことはわかっていましたが、何分 3 次元系で Saxon - Hutner 型定理を定式化するという、最初冒険的だとさえ思った難問が意外に簡単な議論で片ずいてしまったので、私としては非常に嬉しく、当面その応用を考えることに追われていた次才です。何れにせよ非周期系のスペクトルの理論がこのように急速に一般的且つきれいに簡単になってゆくのは非常に嬉しいことで、私の論文がその一段階で、いささかコロンブスの卵的役割を果たしたとすれば、こちらで研究に集中した甲斐が十分あったと喜んでおります。

さて、数学的にきれいに理論を整備することは私の得意ではありませんので、松田さんにおまかせすることにした方がよいと思うので、私なりに考えた二・三の応用についておしらせしたいと思えます。最も重要な問題は多分この方法を使って 3 次元格子の generalized special frequency (GSF) の critical mass ratio (CMR) を求めることでしょう。一次元の場合にはすでに知られている通り CMR を求める問題もまた Saxon - Hutner 型定理に帰着しますが、3 次元では evaporation 型の議論をやっても NaCl 型の場合のようには話がうまく行かず、一般には Saxon - Hutner 型の statement に持ってゆくことが出来ません。しかし各 GSF の CMR を求める問題を、比較的簡単な構造をもつ disordered lattice のどれか 1 つの impurity band (この定義は普通と一寸ちがいますがくわしいことはのち

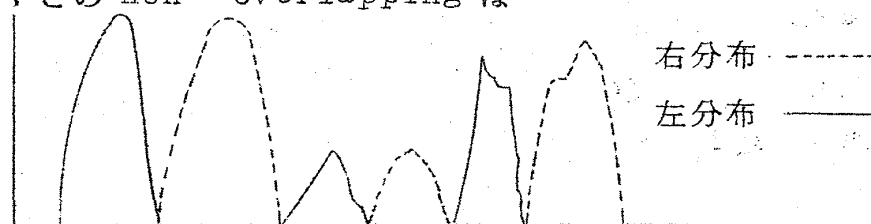
海外だより

ほどお送りする予定のプリプリントにゆずります)の上限を評価する問題に reduce 出来ることが示されます。例えば3個の軽い原子からなる cluster (island) のみを含む格子は3つの impurity band をもちます(どの cluster も dynamical に equivalent だと仮定して— Rosenstock — Newell モデルで central force constant と non-central force constant を等しいとすればこの仮定がなりたつ)が、その1つの upper bound を評価することによって、ある1つの GSF の CMR が評価出来ます。甚だタイミングのよいことに、丁度 Dean がこの問題を、私が来る前から考えていて、加藤敏夫氏のエルシート演算子の固有値の bound の理論またはそれを若干拡張したものが localized — mode frequency 及び impurity band の bound の計算に使えることに気がつき、その話をきいたり、プリプリントをよませてもらうことが出来ましたので、さっそくそれを使って簡単な場合についてすべての GSF の CMR を評価してみました。それと数値実験との比較は、モデルが簡単すぎるために対応する実験がなく今のところまだ出来ませんが、より realistic なモデルに対する計算をひき続き行なう予定です。Dean の方法を用いると localized — mode frequency に対して極めて精密な値が得られる(即ち非常によい bound が得られる)ので、CMR に対してもかなりよい値が得られることが十分期待されます。加藤氏の理論を Dean の仕事を通じて私が使うことになったのは、いささか皮肉な現象です。なお Dean の論文は“Strict bound for out-of-band frequencies due to impurities and defects in solids”という題で Proc Phys Soc 及び今秋の Los Angeles Conference の Proceedings に発表される予定です。

今1つの応用は non — isotopic な場合です。これは全く誰でも考える direct generalization にすぎませんが、この場合には普通の意味での Saxon — Hutner 定理はなりたたず、広い意味での constituent lattice を考えて始めて Saxon — Hutner 型の定理がなりたちます。この結果特殊なモデルのある gap については、より specific な方法(例えば islandization method のような)がより強い結論を与えることがあり得ますが、これは理論の一般性のやむをえない結果です。これについても一応まとめ

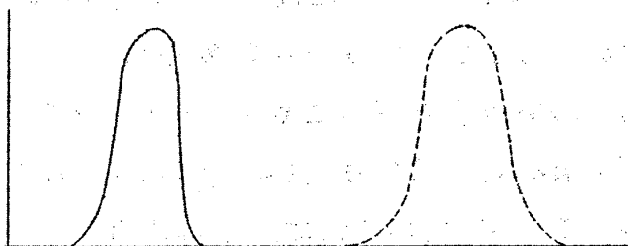
ましたので近くプリプリントをおめにかけてもらえると思います。

一方、この Mathematics Division には KDF 9 という computer があり、それを使っての研究が盛で、プログラマーも多数ありますので、その便宜を利用してこちらに来る前に南さんと一諸にやっていた eigenmode の localization の研究を電子系に対してやりたいと思い、そのプログラミングを依頼してあったのですが、丁度 gap の問題に関する仕事が一段落ついた頃それが完成しましたので、目下データテープのパンチを毎日 15 分位やって computers に送ってやり、翌日もどいて来る計算結果を眺めているいろいろこねくろのを enjoy しています。これは要するに 1 次元の liquid - like disordered Kronig - Penney model における phase の分布の計算ですが、vibration の場合に得られた分布のエルゴード性や degree of localization に関する結論と同じ結論が得られるほか、liquid - type chain のいわゆる “quasi-gap” に関して面白い結論が得られそうです。即ち liquid - type chain では phase theory によって predict されるよりはるかに広い gap が見出されており、その本質が不明のままになっています。gap を系を右から追いかけた時の phase 分布と左から追いかけたときの分布が non - overlapping であるようなエネルギー区間として定義しますと、これは transfer matrix の双曲性によって定義される phase - theoretical gap よりも一般に広くなります。Liquid - like chain の gap はこのタイプの gap として説明されます。実際、右からと左からの phase 分布を計算してみますと、quasi - gap の中ではこれらが完全に non - overlapping になることがわかります。但し computer による計算ですから、本当に完全に non - overlapping になるかどうかは分かりませんが、少なくとも almost non - overlapping になることはたしかで、これを quasi-gap の生ずる原因と考えることが出来るわけです。振動の場合にも、special frequency のところでは両 phase 分布が non - overlapping になりますが、この non - overlapping は



海外だより

の型のもので、振動数を一寸変えると忽ち overlap してしまいます。これに対して liquid-type chain の電子エネルギーの場合には



のようなタイプの non-overlapping であるため、かなり広いエネルギーの領域にわたって non-overlapping が持続することが出来、quasi-gap が生じるわけです。

私のやっていることは以上のようなのですが、Dean の研究室では、この前おしらせしたガラスや水の振動スペクトルの計算や上述の strict limit の他にも面白い仕事いろいろやられています。その一つに、振動数スペクトルの対称性に関する理論があります。これは interaction がある種のかかなり一般的な条件をみたす場合には、 ω^2 のスペクトルが $\omega^2_{\max}/2$ のまわりに対称な部分と、いくつかの S 型スペクトルの重ね合わせになるということ、及び $\omega^2_{\max}/2$ に関して対称的位置にある振動数に対応する mode は、互に非常に簡単な関係にある波形をもつという理論ならびにその computer demonstration です。規則格子ばかりでなくある種の disordered lattice のスペクトル及び mode に対してもこの性質がなりたちますので、うまく使うと実験の解析にも理論的考察にも役立ちそうです。この論文は "Spectral Symmetry in Lattice Dynamical Models" R. J. Bell and P. Dean で、Proc. Roy. Soc. に出る筈です。

この他、いわゆる resonance mode に関する数値実験が目下進行中で、まだ断定出来ませんが、有限系に重い impurity を一個入れると、ある 1 つの mode が impurity のところで非常に大きい振巾をもつらしいです。もしこれが本当なら有限系のスペクトルと無限系におけるいわゆる resonance scattering との関係をつきとめるのに有用なデータとなりそうです。

こちらは 6 月に入って以来 1 ヶ月半ほど快晴続きで、しかも気温は 17°C ~ 20°C の適温ですので、実に快適な毎日です。御地はもう猛暑の頃と思います。くれぐれもお大事にお過ごし下さい。

堀 淳 一