

# 「三次元無秩序格子における一般化された Special Frequency II」

北大理 和田 宏，堀 淳一

## § 1. 序

最近接相互作用をもち、同位原子を無秩序に含む一次元振動子系の振動スペクトルの数値計算が Dean<sup>1)</sup> によって行われ、その結果スペクトル密度が原子の配列に無関係に零となる“Special Frequency”(SF)が発見されたが、これの本性は“phase theory”によって完全に説明された。<sup>2)</sup>

二次元、三次元の高次元格子では、もはや厳密な意味での Special Frequency は存在しえないことが堀及び松田によって示された。<sup>2)</sup> しかしながら、軽い同位原子の配列に関して制限をつけ、重い原子との質量比を適当に選ぶならば、なおスペクトル密度が消える振動数(一般化されたSF)が存在することが予想される。なぜならば、まず重い方の質量を無限に大きくすると、最近接相互作用でつながっている軽い原子の島、あるいは不純物クラスター<sup>3)</sup>のみの振動が残るであろう。これらの振動の振動数を松田に従って、island frequency と呼ぶことにしよう。これらは離散的な振動数としてスペクトルに現われ、その間にはスペクトルの谷間が生じている。そこで、今、重い原子の質量を軽くしていくと、軽い原子と重い原子は相互作用をはじめると Rayleigh の定理によると、構成原子の質量を軽くしていった時、各々の固有振動数は決して減少することはない。もしも、あらゆる種類の軽い同位原子からなるクラスターをはじめに許しておけば、スペクトルは一樣に塗りつぶされていくであろうが、特定の種類のクラスターのみ存在をはじめに仮定しておくならば、この様な塗りつぶしは行われず、有限個の island frequency を中心として不純物振動帯的なものを生じ、この振動数帯間には依然として、スペクトルの gap が残るであろう。さらに質量の相対比を小さくしていくと、この谷間も次々と埋められていくが、正にこの谷間が埋めてしまわれようとする質量比が臨界質量比となり、そのところの振動数が一般化した Special Frequency となるわけである。

以上の議論から明らかなように一般化された Special Frequency およびそれを与える臨界質量比を求めるには、不純物帯の上限と下限とを求めていけば良いことがわかる。この上限と下限の評価に関しては、最近、Dean<sup>4)</sup>が局在振動数の上限、下限の研究から端を発して求めた公式がある。堀はやはり Rayleigh の定理を用いて、不純物帯の上限と下限を評価するためには、我々の考えている格子から作られるもっと不純物クラスターの種類の少ない、簡単な格子に対して Dean の公式を使えば充分であることを示し、実際に三次元格子の最も簡単な場合に対して、一般化された Special Frequency を与える臨界質量比を求めた。以下この論文を I とよぶ。しかしながら I では、考え得る最も小さい不純物クラスター（以下クラスターと略称する）をとっているために、低濃度で不純物が含まれる場合には臨界質量比が過大評価されているはずである。この報告の目的は、クラスターを一まわり大きくとるとどの位この過大評価をおさえることが出来るかを示すことである。

## § 2. 簡単な格子への還元

不純物原子を L で、母体の原子を H で表わす。また三次元立方格子を考え中心力と非中心力は等しいと約束する。すると I におけるクラスターのとり方と、ここでのとり方との比較は Fig. 1 のようになる。I の場合には (c) と (d) は運動方程式としては、全く同等であるが、我々の場合には (c) と (d') は明らかに異なった振動系である。そのために I では縮退していた振動数が近くではあるが分離し、Dean の公式はそのままの形では使えなくなる。

クラスター (a'), (b'), (c'), (d') をそれぞれ  $L$ ,  $LL$ ,  $LLL$ ,  $LL$ <sup>L</sup> とかき、これらと H をハイフンでつなぐことによって、母体にそのクラスターが無秩序に含まれていることを表わすものとする。最も簡単なモデルとして  $H-L-LL-LLL-LL$ <sup>L</sup> で表わされる格子を考えよう。この格子から (a'), (b'), (c'), (d') を適当に落すことによって、はじめの格子よりもクラスターの種類の少ない、簡単な格子を作ることができる。このようにして作られた簡単化された格子と、もとの格子の振動数準位の間の一つつつ Rayleigh の定理を使って調べ上げると Fig. 2 のような結果に到

和田 宏, 堀 淳一

Fig. 1 I

(a)

L

(b)

L-L

(c)

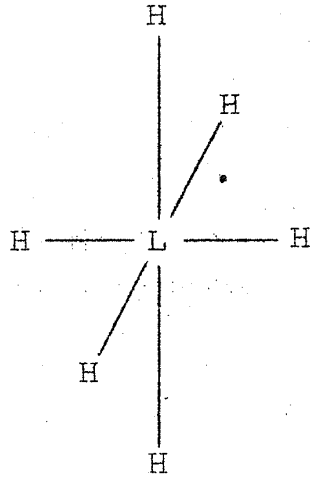
L-L-L

(d)

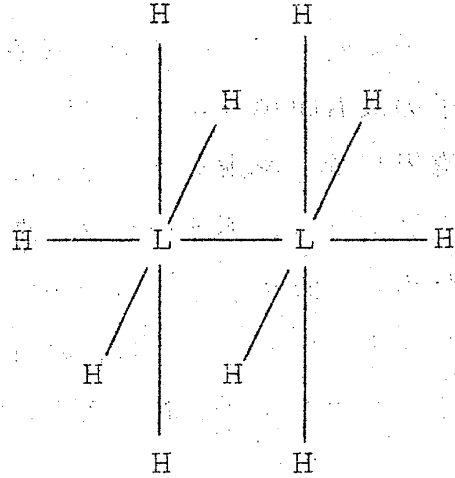
L  
|  
L-L

II

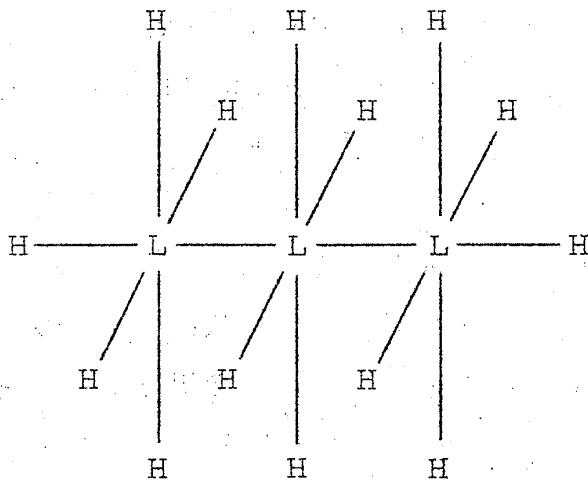
(a)'



(b)'



(c)'



(d)'

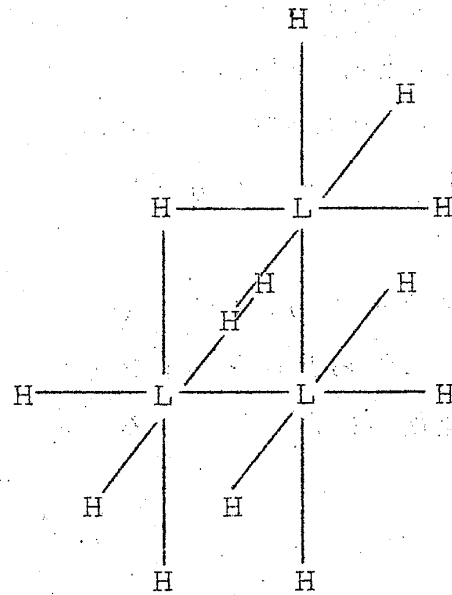
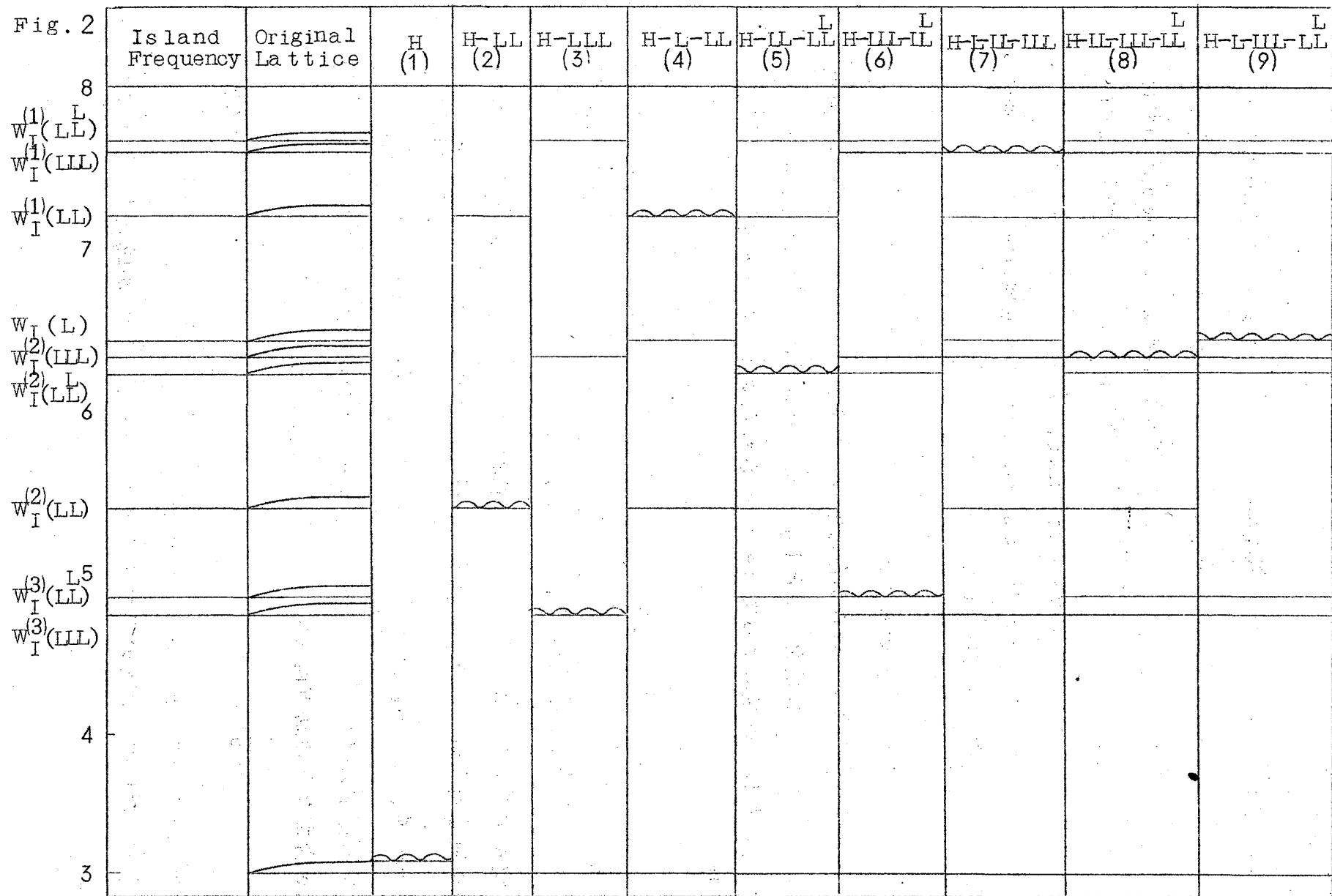



Fig. 2



「三次元無秩序格子における一般化された Special Frequency II」

和田 宏, 堀 淳一

達する。

たとえば (c') から生じた不純物帯の, 上から数えて  $i$  番目のものを  
(1)  
 $I^{(1)}$  (LLL) とかくことにすると, はじめの格子の  $I^{(3)}$  (LLL) バンドの上限  
を求めるためには, H-LLL 格子の一番下の不純物帯の上限を求めればよい  
ことが Fig. 2 の  という記号で示されているのである。同様に  
(2)  
 $I^{(2)}$  (LL) バンドの上限を求めるためには, H-LL 格子の一番下のバンドの  
上限を求めればよいことがわかる。Rayleigh の定理の使い方の詳細につい  
ては論文 I を参照せられたい。

### § 3. Dean の公式とその拡張

一種類のクラスターのみが在る場合を考えよう。  $i$  番目の原子の平衡点か  
らの変位を  $x_i$ , 質量を  $m_i$  とし,  $i$  番目の原子と  $j$  番目の原子間のバネ定数  
を  $K_{ij}$  とし, 質量によって reduce された変  $u_i$  とバネ定数  $M_{ij}$  をそれ  
ぞれ

$$u_i = \sqrt{m_i} x_i, \quad (3.1)$$
$$M_{ij} = K_{ij} / \sqrt{m_i m_j},$$

で定義する。今, 我々が考えている不純物帯を構成しているマトリックス  $M$   
の正確な固有値と固有ベクトルを各々,  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, \vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2,$   
 $\dots, \vec{\phi}_m$  とする。ただし  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m > \alpha > 0$ 。

ある特定のクラスター以外の原子を静止させたときのそのクラスターの時  
間を含まない運動方程式を

$$D \vec{u} = \sigma \vec{u} \quad (3.2)$$

とかく。  $\sigma$  はマトリックス  $D$  の固有値である。今は一種類のクラスターしか  
考えていないので, どのクラスターをとっても (3.2) が成立することにな  
る。

「三次元無秩序格子における一般化された Special Frequency II」

Dを使ってマトリックスMを陽に書くと

$$M = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline D & & & C_1^T \\ \hline & D & & C_2^T \\ \hline & & \ddots & \\ \hline & & & D \\ \hline & & & C_m^T \\ \hline C_1 & C_2 & & C_m & H \\ \hline \end{array} \quad (3.3)$$

$C_i$  はクラスターとまわりの原子との相互作用を表わすマトリックスで  $C_i^T$  はその転置行列を表わす。

$\vec{\omega}_i$  を  $i$  番目の D に対応する空間で  $\vec{v}$  に等しく、他の空間では零成分をもつようなベクトルとし、 $\{\vec{\omega}_i\}$  なる  $m$  個の独立なベクトルの集合を考えると、明らかに

$$\left. \begin{aligned} (\vec{\omega}_i, \vec{\omega}_j) &= \delta_{ij} \\ (\vec{\omega}_i, M \vec{\omega}_j) &= \sigma \delta_{ij} \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

そこで、Mの不純物帯に属する正確な固有ベクトルに対する近似ベクトルとして  $\vec{\omega}_i$  の線形形結合

$$\vec{\omega} = \sum_{i=1}^m r_i \vec{\omega}_i \quad (3.5)$$

を取る。ここで係数  $r_i$  は

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^m |r_i|^2 &= 1 \\ (\vec{\phi}_i, \vec{\omega}) &= 0 \quad i = 2, 3, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

和田 宏, 堀 淳一

という条件により原理的に決定される。

この近似的な固有ベクトルを使うと Dean に従って次の不等式を得る。

$$\sigma \leq \lambda_i \leq \sigma + \frac{\epsilon^2}{\sigma - \alpha} \quad (3.7)$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$

ここで,  $\sigma$  が  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$  の下限であることは Rayleigh の定理で, クラスタのまわりを重くすると, 対応する振動数が下がることから明らかである。また  $\sigma > \alpha$  が仮定されているが, 実際には  $\alpha$  としては考えている不純物帯のすぐ下にあるバンドの上限を選ぶものとする。 $\epsilon^2$  は

$$\begin{aligned} \epsilon^2 &= (C_i \vec{v}_i \cdot C_i \vec{v}) \quad i = 1, 2, \dots, m \\ &= \sum_a \left( \sum_j C_{1j} a_j v_j \right)^2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

で,  $a$  はクラスタの外側の最近接原子にわたって走る。

クラスタの大きさがあまり大きくなければ, 何種類かのクラスタが存在しても, 不純物帯の上限と下限を (3.7) 式を使って比較的容易に計算することができる。しかしながら, 二つ, あるいは三つの不純物帯が近い場合には (3.7) 式はもはやよい評価を与えないことが  $\epsilon^2 / (\sigma - \alpha)$  が大きくなることからわかる。我々のモデルにおいてはこのような状況が実際に生じる。

この困難をさけるためには, 二種類のクラスタに対応するマトリックス  $D^{(1)}, D^{(2)}$  から

$$\begin{aligned} D^{(1)} \vec{v}^{(1)} &= \sigma^{(1)} \vec{v}^{(1)} \\ D^{(2)} \vec{v}^{(2)} &= \sigma^{(2)} \vec{v}^{(2)} \quad \sigma^{(1)} > \sigma^{(2)} \end{aligned} \quad (3.9)$$

によって定義される  $\vec{v}^{(1)}, \vec{v}^{(2)}$  を用いて前と同様に作られる組  $\{\omega_i^{(1)}\}, \{\omega_j^{(2)}\}$  から作った線形結合

$$\vec{\omega} = \sum_{i=1}^k r_i^{(1)} \vec{\omega}_i^{(1)} + \sum_{i=1}^s r_i^{(2)} \vec{\omega}_i^{(2)} \quad (3.10)$$

を近似ベクトルとしてえらべばよい。

ここで

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^k |r_i^{(1)}|^2 + \sum_{i=1}^s |r_i^{(2)}|^2 &= 1 \\ (\vec{\omega}, \vec{\phi}_i^{(j)}) &= 0 \\ j=1, i=2, \dots, k \\ j=2, i=1, \dots, s \end{aligned} \right\} \quad (3.11)$$

ただし、 $\vec{\phi}_i^{(j)}$  は  $\vec{\omega}_i^{(j)}$  に対応する  $M$  の正確な固有ベクトルで  $\lambda_1^{(1)}$  が最大の固有値と仮定されている。前と同様の計算をして、一番簡単な近似を進めると

$$\sigma^{(2)} \leq \lambda_i^{(j)} \leq \sigma^{(2)} + \frac{\sigma^{(1)2} - \sigma^{(2)2} + M_{\max}(\epsilon^{(1)2}, \epsilon^{(2)2})}{\sigma^{(2)} - \alpha} \quad (3.12)$$

$$j=1, i=1, \dots, k,$$

$$j=2, i=1, \dots, s,$$

を得る。ここで

$$\epsilon^{(i)2} = \sum_a \left( \sum_j c_{aj}^{(i)} \vec{u}_j \right)^2$$

記号の意味は前と同様である。

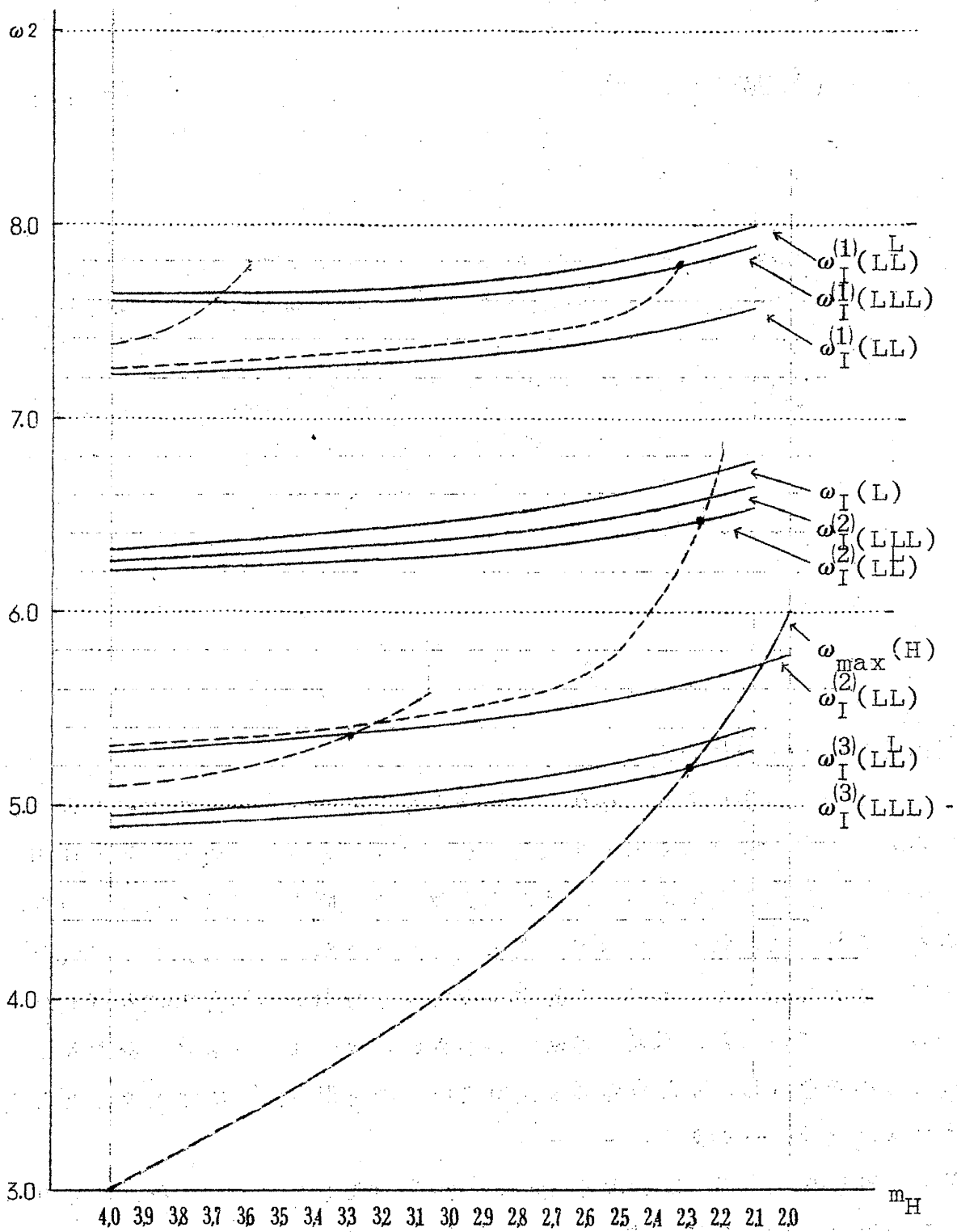
三個の不純物帯が接近して存在する場合もまったく同様にして求められる。これらの式の導出に当たって重要なことはクラスターどうしが直接に相互作用をしてはいけないことである。なぜならクラスター同志が直接に相互作用をすると、これらは新たなクラスターを作ってしまうからである。従って大きなクラスターを考えることは、不純物の密度が十分小さい場合にのみ可能なのである。逆にいうと、不純物の密度が小さいときにはクラスターを大きくとることができるし、また臨界質量比のよい評価を得るためには大きくとらなければならないのである。

以上の事柄を使って I におけるよりも一廻り大きくクラスターをとって計算した結果を Fig. 3 に示す。



和田 宏， 堀 淳一

Fig. 3



$$m_L = K = 1$$

点線と実線との交点・の横軸が臨界質量比を縦軸が一般化された Special Frequency を与える。

I で求められた臨界質量比と、上に求めた臨界質量比とを比較してみると

	I	我々の結果
$\omega_I^{(1)}(\text{LLL})$	12.08	2.21
$\omega_I^{(1)}(\text{LL})$	3.00	$4 < x < 5$
$\omega_I^{(2)}(\text{LLL}) = \omega_I(\text{L})$	3.40	2.24
$\omega_I^{(2)}(\text{LL})$	4.99	3.30
$\omega_I^{(3)}(\text{LLL})$	2.62	2.30

単位  $H/L$

下の三つの場合は予想通り臨界質量比は小さくなっている。はじめの二つの臨界質量比の値の著しい不一致は、 $\omega_I^{(1)}(\text{LLL})$  については I では Dean の公式でなくてより精度の悪い Frobenius の定理を用いたためであり、 $\omega_I^{(1)}(\text{LL})$  については I におけるクラスターのとり方では二つの不純物帯が接近するという状況が起らず、より精度の高い評価が出来るためである。従って  $\omega_I^{(1)}(\text{LL})$  については上に得られた臨界質量比の値は実際よりもはるかに大きい値になっているのであって、(3.12) にはなお改良の余地があることを示している。

#### 参 照 文 献

- 1) Dean, P. Proc. Roy. Soc. A., 254, 529 (1960)
- 2) Hori, J. Spectral Properties of Disordered Chains and Lattices. (Oxford: Pergamon Press) (1968)
- 3) Matsuda, H. Prog. Theor. Phys
- 4) Dean, P. 1967, Proceedings of the International Conference on Localized Excitations in Solid held at the University of California, Irvine.
- 5) Hori, J. J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.) 1, 304 (1968).