中間状態とエネルギー論

新上和正（NTT通研）

［要約］結晶状態には、周期、準周期、アモルファス（ランダム）状態の他に、中間状態という新しい状態があることを提案した。しかし、ここでは、中間状態は多粒子間の２体力相互作用のレンジが有限である限り、１次元系（格子気体模型）では現われないことを示す。

序論　前研究会（物性研究所短期研究会「準結晶の構造と物性」）で、２体力で相互作用（図１）する多粒子系の基底状態を１次元格子気体模型で考察し、相互作用レンジN_Rと粒子密度ｃの関数として

（１）　周期状態　　　　　（$W_N=1$）

（２）　準周期状態　　　　（$W_N=1$）

（３）　アモルファス（ランダム）　（$W_N=e^{\alpha N}$）

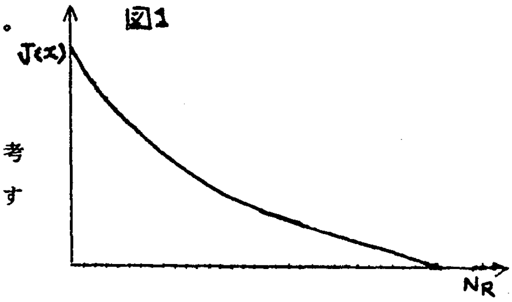
の３種類が現われる事を述べた。括弧内には状態の縮退数の粒子数Ｎの依存性をしめす。しかし、この結果は１次元格子気体模型と図１の相互作用を仮定した。そこで、「これら３種の状態は多粒子系の全て安定な配置を尽くしているか？」という疑問に導かれる。これに答えるために、W_NのＮ依存性を調べた。(1),(2)のW　は有限で、構造はdecidable である。一方、(3) はＮと共に発散し、結果として、構造はundecidable となる。さらに、(3) のW_Nの関数型は系を多くの部分系に分割したときの部分系の統計的独立性を保証する。この２つの考察から、次の性質を持つ新しい（中間状態と呼ぶ）状態に導かれる。

（Ａ）構造のundecidability。つまり、W_NはＮと共に発散する。

（Ｂ）部分系のstatistical non-independence。つまり、W_Nの発散は指数関数型程には強くない。

性質（Ａ）より、中間状態は非周期的であり、性質（Ｂ）より、中間状態は多くの状態があるにも拘らず１粒子当たりのentropy=0 である。従って、中間状態は周期、準周期状態とアモルファス状態との中間に位置する。ここで提案された中間状態[1,2]とShechtmanite（準結晶）との関係は明らかにされるべき問題であるが、両方は深い関係にあると考えられる。前研究会で,(1)Shechtmaniteの構造模型としてよく引用される2D-Penrose tiling は中間状態である、(2) どんな２体力相互作用でも相互作用レンジが有限である限り、１次元格子気体模型では中間状態は現われないことに触れた。この講演は、(2) の証明を与え、合わせて相互作用レンジ無限大で新たな状態が現われる可能性を推測する。

図1



1　構造問題

１次元格子気体模型で基底状態の粒子配置を考える。粒子系は第Ｍ番目最近接粒子間まで２体力で相互作用するとする。他の重要なparameter は粒子密度ｃで

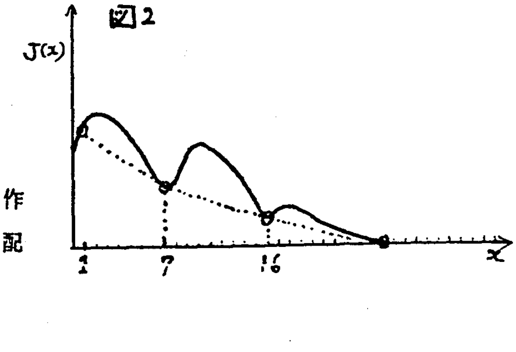
$$c=\lim_{\substack{N\to\infty\\N_0}} N/N_0 \qquad (1-1)$$

で定義される。この時、相互作用エネルギーＥは

$$E=N\sum_{i=1}^{M}E_i \qquad (1-2)$$

と分解できる。ここで、E_iは第ｉ番目の最近接粒子間相互作用である。始めにＭ＝１と２迄の相互作用を考慮した場合の配

図2



置を導き、一般のMの場合へと進む。

<u>(1-1) M＝１のみの場合</u>　このとき、エネルギーは

$$E_1 = \sum_{n=1}^{\infty} p(n) J(n) \qquad (1\text{-}1\text{-}1)$$

$E =$

p(n)は、固定した粒子から距離ｎにある粒子確率であり、

$$\sum_n p(n)=1 \quad と \quad \sum_n np(n)=1/c \ \ (平均粒子間距離) \qquad (1\text{-}1\text{-}2)$$

を満たす。(1-1-2) の下で(1-1-1) を最小にするp(n)を見いだす手続きは、先ず、与えられた相互作用（図２）を下に凸な多角形で置き換える。ここで重要なｎの値はn=1,7,16のような多角形の頂点である。もし、1/7<1/c<1 ならp(1)=0=p(7) であり他はp(n)=0である。p(1)とp(7)は(1-1-2) から決まる。この時、粒子配置はの粒子間隔１と７がランダムに並んだものである。他方、c=1/7 のような場合にはp(7)=1で他のp(n)は０である。よって、粒子配置は粒子間隔７が周期的に並んだものである。従って、M＝１のとき(i) ランダムか(ii)周期的のどちらかである。(i) のentropy 計算は容易である。

<u>(1-2) M＝２までの場合</u>　エネルギーは

$$E_1 + E_2 = \sum_n p(n) J(n) + \sum_{n_1, n_2} p(n_1; n_2) J(n_1 + n_2) \qquad (1\text{-}2\text{-}1)$$

となる。p(n ;n)は固定した粒子からｎ　、さらにｎ　離れたところに粒子がある（２体の）確率である。(1-2-1) に課す条件は(1-1-2) の他に

$$\sum_{n_1} p(n_1; n_2) = p(n_2) \quad と \sum_{n_2} p(n_1; n_2) = p(n_1) \qquad (1\text{-}2\text{-}2)$$

ある。(1-2-2) を用いて(1-2-1) は

$$E_1 + E_2 = \sum_{n_1, n_2} F(n_1; n_2)\, p(n_1; n_2) \qquad (1\text{-}2\text{-}3)$$

$$F(n_1; n_2) = \frac{1}{2}[J(n_1) + J(n_2)] + J(n_1 + n_2) \qquad (1\text{-}2\text{-}4)$$

と書ける。$F(n_1;n_2)$の２つの引き数の交換の対称性から$p(n_2;n_1)$も(1-2-3) の解である。(1-1-2) と(1-2-2) の下でエネルギーを最小にする解を見つける手続きは、$F(n_1;n_2)$を、M＝１の場合と同様に下に凸な多角形でおきかえる。その多角形は$F(n_1;n_2)$と少なくとも４点(m_1,m_3),(m_3,m_1) 又は $(m_2;m_4)$,$(m_4;m_2)$で接する。しかし、許される配置を具体的に調べてみれば、$m_1=m_2$ が成立することが解かる。このことから、$p(m_1;m_3) \neq 0 \neq p(m_1;m_4)$ であり他は０である。ただし、$p(m_1;m_3)=p(m_3;m_1)$, $p(m_1;m_4)=p(m_4;m_1)$ 。$p(m_1;m_3)$, $p(m_1;m_4)$を具体的に求めると、

$$p(m_1; m_3) = \frac{1}{m_4 - m_3}\left\{\frac{1}{c} - \frac{m_1 + m_4}{2}\right\}$$
$$p(m_1; m_4) = \frac{1}{m_4 - m_3}\left\{\frac{m_1 + m_3}{2} - \frac{1}{c}\right\} \qquad (1\text{-}2\text{-}5)$$

もし，$p(m_1;m_3)$と$p(m_1;m_4)$が(i) 共に０でなければ、粒子配置はランダムに、(ii)どちらかが０であれば周期的配置になる。

<u>(1-3) 一般のMまでの場合</u>　この場合の粒子配置はM＝１と２の場合からほとんどstraightforward に与えることができる。ランダム配置は、M＝２と同様にすると$p(m_1;m_2;..;m_{M-1};m)$ と$p(m_1;m_2;...;m_{M-1};m')$から得

られる。このとき、$p(m_1;m_2;\ldots;m_{M-1};m)$のM個の引き数を巡回置換して得られる全てのものが解である。$p(m_1;m_2;\ldots;m_{M-1};m)$ と$p(m_1;m_2;\ldots;m_{M-1};m')$を具体的に求めると、

$$
\begin{aligned}
p(m_1;m_2;\cdots;m_{M-1};m) &= \frac{1}{m'-m}\left\{\frac{1}{c}-\frac{m_1+\cdots\quad+m'}{M}\right\} \\
p(m_1;m_2;\cdots;m_{M-1};m') &= \frac{1}{m'-m}\left\{\frac{m_1+\cdots\ m}{M}-\frac{1}{c}\right\}
\end{aligned}
\qquad (1\text{-}3\text{-}1)
$$

M＝２の場合と同様に、 $p(m\ ;m\ ;\ldots;m\ ;m\ )$と$p(m\ ;m\ ;\ldots;m\ ;m\ )$が(i) 共に０でなければ、粒子配置はランダムに、(ii)どちらかが０であれば周期的配置になる。

まとめと結語　これまでの結果をまとめると、１次元格子気体模型での多粒子系の基底状態は

有限レンジで　（イ）周期状態、又は（ロ）アモルファス（ランダム）状態

無限レンジで　（ハ）周期状態、（ニ）準周期状態、（ホ）アモルファス（ランダム）状態、（ヘ）？

（ハ）と（ニ）は相互作用が下に凸であれば容易に現われる[3)]。また、（ホ）はあまり現実的ではないが、相互作用が距離に比例して、減少又は増大するとき現われる。（ヘ）はまだ現われていない状態である。ここではさらに進んで、この（ヘ）の？を考えてみよう。レンジが有限であれば、粒子配置は２つのクラスターのランダムな分布であった。レンジをどんどん増大してゆくと各クラスターサイズは増大し結果として１粒子当たりのentropy は減少する。レンジ無限大のリミットでentropy=0 である。このとき構造は１意的に決まる。構造が１意的に決まるものに周期状態と準周期状態があった。周期状態と準周期状態の粒子配置の特徴は粒子分布の一様性である。この性質のためdiffraction pattern はシャープであった。適当な相互作用での下で粒子分布の一様性が破れはしまいか？　このときdiffraction pattern はfuzzy である。この状態があるなら、構造が１意的に決まるが粒子の空間分布はランダムである。この状態を生成する相互作用型についてはこれからの問題である。

文献

(1) Shinjo K. and Sasada T., J.Phy.C Letter 18(1985)L261
(2) Shinjo K.,　Sasada T. and Sugano S., Phys. Rev.B34(1986)391
(3) Pokrovsky V.L. and Uimin　G.V., J.Phy.C 11(1978)3535