

第2近接力と一次元格子の振動

埼玉大・教育 小 暮 陽 三

(7月22日受理)

§1 まえがき

不純物を1個含む格子の振動については、いまさらとり上げる必要もないくらい詳細に検討されている。しかし、ほとんどは最近接力のみをとって議論をしていて、筆者の知る限りでは K. Ishii¹⁾ が等比級数状にばね定数が減少する一次元格子を扱って局在振動の発生条件と Resonant Mode の存在を証明しているくらいである。Ishii のモデルでも、最近接力のみ的一次元格子と同じく、不純物の質量が母体粒子の質量よりも軽ければ局在振動が発生した。

一方、T. Kotera²⁾ は E. Montroll³⁾ のランダム・ウォークモデルと格子振動とを対応させて、一、二次元では不純物の質量が母体粒子の質量より軽ければ局在振動が発生し、三次元ではある限界値以上軽くないと局在振動が発生しないことを証明している。原点から出発したランダム・ウォーカーが原点に再帰する確率が前二者では1であるに対して、三次元では1に達しないことが証明の骨子である。

以上のような成果から、第2近接力を加えた一次元格子で局在振動を扱っても、おそらく事情はあまり変わるまいと、慢然と筆者は考えていた。大体は片づいている問題を少々複雑にするだけで結論は同じであろうと予想される。しかし、M. Fukushima⁴⁾ が第2近接力をもつ半無限一次元格子では Pseudo Surface vibration が発生するとしていること、一次元の disordered lattice の計算機実験で F. Brouers, J. Delcourt⁵⁾ と J. L. Martin⁶⁾ の結論が対立することなど、案外厄介な問題も残っている。

このノートでは Montroll, Kotera の方法を第2近接力をもつた一次元格子に適用する。結果は、「ある限度以上に不純物の質量が軽くないと、局在振動は発生しない」という少々意外な結論が得られた。第2近接力が加わるとなぜこのような事が起るのか、お教えいただければ幸いである。

§ 2 ランダム・ウォーク

格子振動とランダム・ウォークの対応は E. Montroll によつて一般的に定式化されている。この節では第 2 近接格子点までの飛躍を許容したときの原点再帰の確率を検討する。一次元の格子をとり原点から出発したランダム・ウォーカーが最近接点へ飛躍する確率を $2p$ ，第 2 近接点へ飛躍する確率を $2q$ とし，左右同等であるとする（図 1 参照）。明らかに

$$2p + 2q = 1, \quad (1)$$

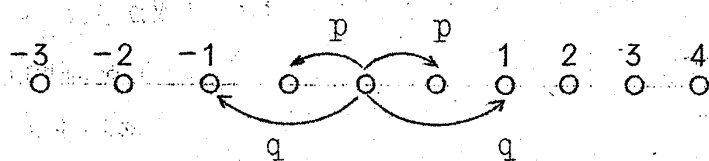


図 1

ランダム・ウォーカーが t 回飛躍をして n 点に滞在する確率を $P_t(n)$ とすると， $P_t(n)$ は

$$P_t(n) = [q e^{-2i\phi} + p e^{-i\phi} + p e^{i\phi} + q e^{2i\phi}]^t \text{ の } e^{in\phi} \text{ の係数} \quad (2)$$

である。 $e^{in\phi}$ の係数を定めるためには

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im\phi} d\phi = \delta_{m,0} \quad (3)$$

を利用して

$$P_t(\ell) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [2p \cos \phi + 2q \cos 2\phi]^t e^{-in\phi} d\phi, \quad (4)$$

で与えられる。 ℓ ， ϕ を N 次元空間のベクトルにとると多次元空間への拡張はやさしい。

$P_t(\ell)$ から母関数 $U(\ell)$ を

$$U(n; z) = \sum_{t=0}^{\infty} P_t(n) z^t, \quad (5)$$

$$U(n; z) = \sum_{t=0}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} [2p \cos \phi + 2q \cos 2\phi]^t e^{-i\phi n} z^t d\phi$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{-i\phi n}}{1 - 2z[p \cos \phi + q \cos 2\phi]} d\phi, \quad (6)$$

$U(\ell; 1)$ は (5) から原点から出発したランダム・ウォーカーが ℓ 点に滞在する確率を表わし, $U(0; 1)$ は原点への再帰確率である。したがって原点への再帰確率は (6) の右辺の格子グリーン関数が判明すれば求められることになる。 $q=0$ とおくと, Montroll が最近接点への飛躍のみに限った格子グリーン関数と一致をする。このグリーン関数の被積分関数を原点附近で展開して, 原点を中心とする半径 ϵ , a ($a > \epsilon$) の範囲について積分すると

$$U(0; 1) \cong \frac{1}{2\pi} \int_{\epsilon}^a \frac{d\phi}{2(\frac{1}{2}p + 2q)\phi^2} = \frac{1}{4\pi(\frac{1}{2}p + 2q)} \left[\frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{a} \right]. \quad (7)$$

$$\therefore \lim_{\epsilon \rightarrow 0} U(0; 1) = \infty \quad (8)$$

$U(0; 1)$ は ϕ の原点付近で発散をする。同様の考察は第3 近接点以上の有限な飛躍ではやはり成立し, さらに各点に残留確率を与えても事情は変わらない。この事は, Montroll, T. Kotera が最近接格子について議論をしているように, 一次元格子で有限な範囲のフック力が各粒子に働く限りでは, 母体粒子の質量よりも軽い不純物を入れると必ず局在振動が発生することになる。おそらく最近接格子と同じく3 次元以上の格子グリーン関数は ϕ の原点でも収束をするであろう。ある程度以上, 不純物の質量が軽くなければ, この場合も局在振動は発生しない。

W. Feller によると, 一般に原点にはじめて再帰する確率 $F(0; 1)$ は

$$F(0; 1) = 1 - U(0; 1)^{-1} \quad (8)$$

であるから, 一次元, 二次元格子で原点から出発したウォーカーは無限時間待てば必ず再帰するが, 三次元以上では再帰しない。我々のモデルでは (8) は成立するから, 全く同様な結論を得る。すべての道はローマに通じるのは地表という二次元空間までに通用する箴言であつて, 宇宙空間にさまようロケットは未来永劫に帰らない確率がある。次節での格子振動と対応をつけるために, $U(n; z)$ が満足する定差方程式を立てる。先の $P_t(\ell)$ は

$$P_{t+1}(n) = p\{P_t(n+1) + P_t(n-1)\} + q\{P_t(n+2) + P_t(n-2)\} \quad (9)$$

小暮陽三

を満足する。 $t+1$ 回の飛躍で格子点 n に滞在する確率は左右 2 個の格子点に t 回の飛躍で滞在していたウォーカーが次の飛躍で n 点に到達する確率の和に等しい。

初期条件としてランダム・ウォーカーは原点から出発するから

$$P_0(n) = \delta_{n,0}, \quad (10)$$

で与えられる。(9)の両辺に z^{t+1} をかけ、 $t=0$ から ∞ まで和をとると、(5) (10)により、母関数 $U(niz)$ は

$$\begin{aligned} U(niz) = & pz [U(n+1iz) + U(n-1iz)] \\ & + qz [U(n+2iz) + U(n-2iz)], \quad (n \neq 0) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} U(0iz) - 1 = & pz [U(1iz) + U(-1iz)] \\ & + qz [U(2iz) + U(-2iz)] \end{aligned}$$

の定差方程式を満たしている。

§ 3 格子振動

原点に不純物を 1 個含む一次元格子をとる (図 2 参照)。格子は左右無限大として、母体粒子の質量を M 、同位体の質量を M' とする。最近接点の間には K 、第 2 近接点の間には K' の力の定数をもつたフックの力が働くものとする。このモデルは 2 節で吟味をしたランダム・ウォークのモデルに対応する。各粒子の平衡点よりの変位を $x(n, t)$ とする。 n は格子点の番号、 t は時間である。

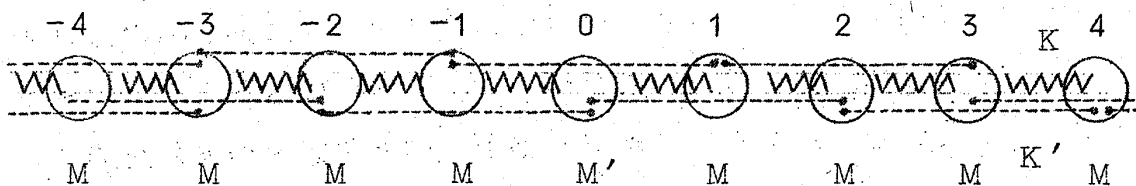


図 2

は最近接力
は第 2 近接力を表わす

この体系の運動方程式は

$$\left\{ 1 + \left(\frac{M'}{M} - 1 \right) \delta_{n,0} \right\} \ddot{x}(n, t) = r \{ x(n+1, t) + x(n-1, t) - 2x(n, t) \} \\ + r' \{ x(n+2, t) + x(n-2, t) - 2x(n, t) \}, \quad (12)$$

ただし $r = K/M$, $r' = K'/M$,

である。 $x(n, t) = e^{i\omega t} x(n)$ とおいて (12) は

$$(2r + 2r' - \omega^2) x(n) = r \{ x(n+1) + x(n-1) \} \\ + r' \{ x(n+2) + x(n-2) \}, \quad (n \neq 0) \\ (2r + 2r' - \frac{M'}{M} \omega^2) x(0) = r \{ x(1) + x(-1) \} \\ + r' \{ x(2) + x(-2) \}. \quad (13)$$

よつて、各格子点の振幅は定差方程式

$$x(n) = \frac{r}{2r + 2r' - \omega^2} \{ x(n+1) + x(n-1) \} \\ + \frac{r'}{2r + 2r' - \omega^2} \{ x(n+2) + x(n-2) \}, \quad (n \neq 0) \\ x(0) = \frac{r}{2r + 2r' - \frac{M'}{M} \omega^2} \{ x(1) + x(-1) \} \\ + \frac{r'}{2r + 2r' - \frac{M'}{M} \omega^2} \{ x(2) + x(-2) \}. \quad (14)$$

で与えられる。

2節の式(11)と(14)を比較すると、格子振動とランダム・ウォークとの間には次の対応が成立する。

$$\frac{r}{2r+2r'-\omega^2} = pz \quad \frac{r'}{2r+2r'-\omega^2} = qz \quad (15)$$

$$\frac{r}{2r+2r'-\frac{M'}{M}\omega^2} = pz' \quad \frac{r'}{2r+2r'-\frac{M'}{M}\omega^2} = qz'$$

力の定数の比 K'/K を q/p とおくと対応 (15) を満たしている。(14) の $x(0)$ を $U(0; z)$ におきかえ、上の処方箋に従って変形すると

$$\frac{z'}{z} U(0; z) = pz \{U(1; z) + U(-1; z)\} + qz \{U(2; z) + U(-2; z)\} \quad (16)$$

(11) と比べて

$$\frac{z'}{z} U(0; z) = 1 - [U(0; z)]^{-1}, \quad (17)$$

が z ，すなわち不純物によつて生じた振動数を決める式である。(15) によつて (17) を書き直すと

$$\frac{2(r+r') - \frac{M'}{M}\omega^2}{2(r+r') - \omega^2} = 1 - U\left[0; \frac{2(r+r')}{2(r+r') - \omega^2}\right]^{-1} \quad (18)$$

になる。 $U(0; z)$ は式 (6) で定義したグリーン関数である。ただし (18) は、(15) により

$$z = \frac{1}{p} \frac{r}{2r+2r'-\omega^2} = \left(1 + \frac{r'}{r}\right) \frac{2r}{2r+2r'-\omega^2} = \frac{2(r+r')}{2(r+r') - \omega^2} \quad (19)$$

を使っている。

(18) で M'/M を与えると ω^2 を定めることができる。(18) は最近接相互作用のみをとつた Kotera の結果に $r' = 0$ とすると一致をする。(18) の $2(r+r')$ は規則格子の最高振動数の平方 ω_L^2 の $1/2$ である。最近接相互作用の最高振動数の平方 $4r$ に比較して明かに大きい。これは第 2 近接点にもフックの力を加えると復元力の増加を結果としてもたらすためである。

よつて $\omega_L^2 = 4(r+r')$ とすると、

$$\frac{\omega_L^2 - 2 \frac{M'}{M} \omega^2}{\omega_L^2 - 2\omega^2} = 1 - \left[U(0; \frac{\omega_L^2}{\omega_L^2 - 2\omega^2}) \right]^{-1}, \quad (20)$$

局在振動に注目すると、 ω が ω_L から無限大になるにつれて左辺は $2M'/M-1$ から M'/M まで変化をし、グリーン関数の変数は1から0まで変化をする。このことは式(5)に $z=-1$ を代入すると

$$\begin{aligned} U(0;1) &= P_0(0) - P_1(0) + P_2(0) - P_3(0) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P_{2n}(0) - \sum_{n=0}^{\infty} P_{2n+1}(0) \end{aligned} \quad (21)$$

であるから、ウォーカが偶数回飛躍して原点に回帰する確率と奇数回の飛躍で原点に回帰する確率の差が $U(0;-1)$ に相当する。この値は飛躍の確率 p, q によつて変化する。最近接点のみの飛躍を許すときには、奇数回の飛躍で原点に回帰することはないから、(21)の右辺第2項は0である。第2近接点までの飛躍を許すと、奇数回の飛躍で原点に戻ることは可能であるから、この項は0ではない。この点が局在振動発生に条件に影響を及ぼす。

(20)を、さらに

$$\left(1 - \frac{M'}{M}\right) \frac{2\omega^2}{\omega_L^2 - 2\omega^2} = - \left[U(0; \frac{\omega_L^2}{\omega_L^2 - 2\omega^2}) \right]^{-1} \quad (22)$$

に変形する。

Montroll⁷⁾ は最近接力の格子について

$$(M-M')\omega^2 g(0) = 1 \quad (23)$$

をおいているが、彼の格子グリーン関数を拡張して

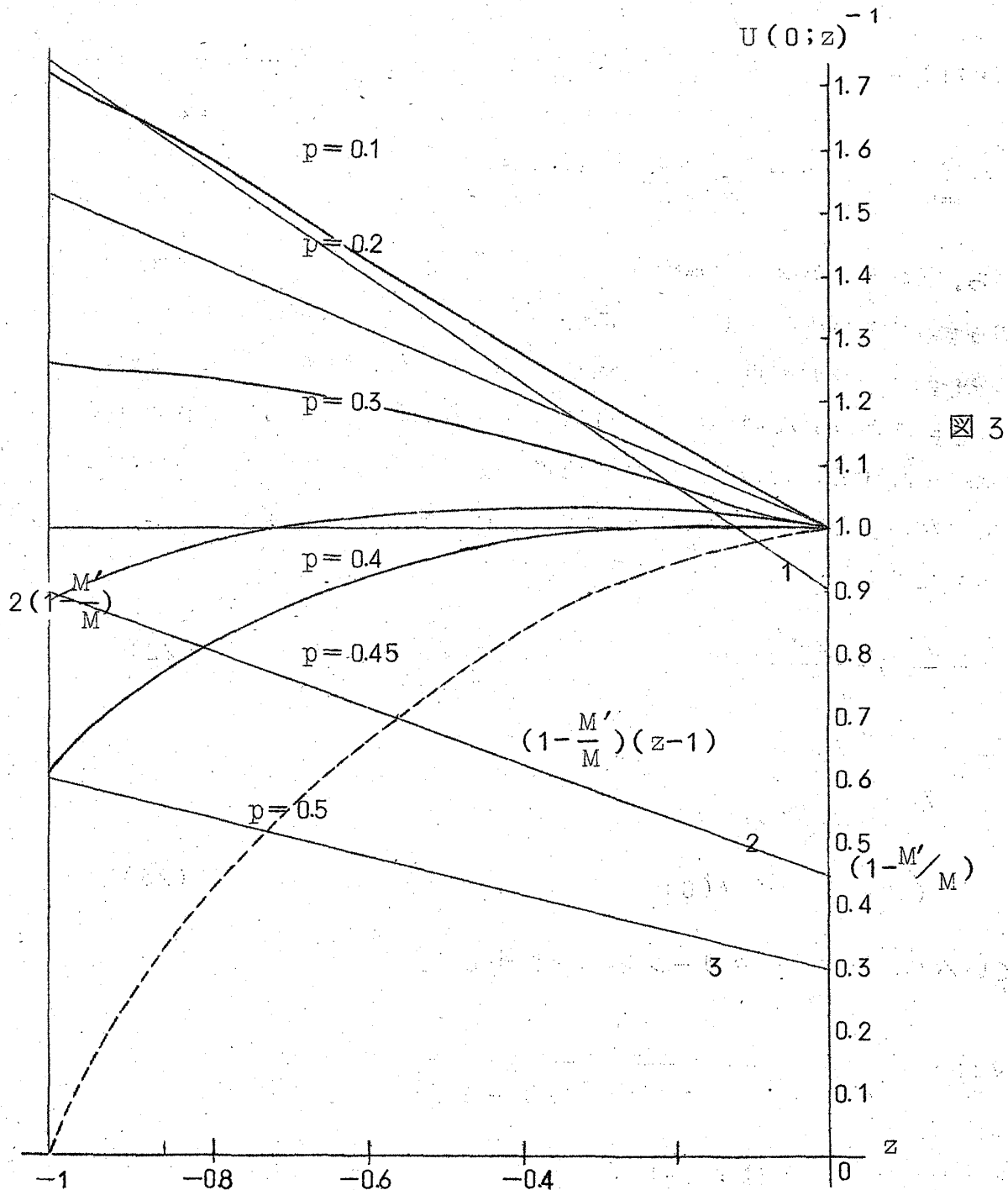
$$g(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{M\omega^2 - 2K(1 - \cos \phi) - 2K'(1 - \cos 2\phi)} \quad (24)$$

とおくと(23)と(22)は全く同一である。

(22) を変数 z に再び改めると

$$\left(1 - \frac{M'}{M}\right)(1-z) = [U(0; z)]^{-1} \quad (25)$$

z は (19) で与える, (25) を解くためには右辺のグリーン関数を知る必要がある, この関数は解析的に求めるのは困難である。計算機によつて $p = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.45$ の場合を求め, $U(0; z)$ の逆数を画くと図 3 になる。



$z=0$ は $\omega^2 = \infty$ に相当し, $\omega^2 \rightarrow \omega_L^2$ のときは $z=-1$ である。このグラフは最近接格子の相互作用のみをとったグリーン関数とは著しい相違を示し, 局在振動発生条件に変更をもたらす。特徴をあげると,

1) $z=-1$ で $U^{-1}(0, z)$ は 0 にならない。図3の点線と比較すればこの有様は明かである。

2) p が増加するにつれて, すなわち最近接相互作用が増加するほど $U^{-1}(0, z)$ は減少し, $p=0.5$ のグラフに接近する。

(25) の左辺は $z=0$ で $1 - M'/M$, $z=-1$ で $2(1 - M'/M)$ の値をとると直線である。図3の1, 2, 3 は M'/M がそれぞれ 0.1, 0.45, 0.3 の場合を表わす。この直線と $U(0; z)^{-1}$ との交点が局在振動の振動数を与える。点線(最近接力)とは異なり, p と M'/M の値に応じて交点の存在しない領域がある。したがって不純物の質量が母体粒子の質量よりも単に軽いだけでは局在振動は発生しない。ある限度よりも軽くないと, 局在振動は発生しないことになる。この限界値は, 図3の $z=-1$ での交点から

$$\frac{M'}{M} < 1 - \frac{1}{2} U(0; -1) \quad (26)$$

で与えられる。 $U(0; -1)^{-1}$ の値をとって具体的には表1の結果を得る。

表 1

p	$U^{-1}(0)$	M'/M
0.1	1.77	0.11
0.2	1.54	0.23
0.3	1.26	0.37
0.4	0.88	0.56
0.45	0.62	0.69
0.5	0	< 1

§ 4 結 び

$z = -1$, すなわち Band Top に ω が上から近づくとき, $U(0; -1)$ が有限であることが, 一見奇妙な結論を導いた。3次元最近接力格子と事情は類似している。数学的には2節での $\phi = 0$ 近傍の発散ではなく, $\phi = \pi$, 積分の上限での収束が原因である。このことは(6)で ϕ を π に近づけても収束し, 一方 $p = \frac{1}{2}$, $q = 0$ とした最近接力では発散することから明かである。Ishiiのモデルは無限等比級数をとつてグリーン関数を計算しているので, このノートのモデルとは直ちにつながるわけではない。したがつて有限の範囲でのフック力をとつたときの特殊な事情があると思われる。事実, Ishii モデルのグリーン関数は ϕ の特別な値に対して, $z = -1$ で発散することが確かめられる。

春日遅々として怠け者の筆者に変わぬ指導を頂いている戸田盛和教授に感謝します。また, Okittac 5090 計算機で数値計算をして頂いた三木みちこ嬢に謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) K. Ishii Prog. theor, Phys. 39 593 1968
- 2) T. Kotera Prog. theor. Phys. Sup. No.23 141 1962
- 3) E. Montroll Proc. Sym. Applied. Math. XVI 193 1964
- 4) M. Fukushima Science Report, College of Education,
Osaka Uni, 16 No.2 1967
- 5) F. Brouers, J. Deltour; Physica 37 139 1967
- 6) J. L. Martin Proc. roy. Soc. A260 3 1961
- 7) E. Montroll Jheory of Lattice Dynamics in the Harmonic
Approximation 161 1963
- 8) W. フェラー 確率論とその応用 (上) (紀之国屋書店)
河田竜夫 訳