

格子場内の一電子波動函数

広 田 徹 (芝浦工大物理)

(4月30日受理)

§ 1 序

格子場内を運動する1個の電子の波動函数を求めるのは、多くの散乱ポテンシャルが存在するときの Schrödinger 方程式を解く問題に帰せられる。散乱ポテンシャルが少ない場合は、平面波からの摂動が使える。即ち、各散乱中心からの部分波を夫々足せば良いわけである。又周期格子の場合は Bloch wave 解があり、不純物が存在するならば Bloch wave 解からの摂動が成立する。不純物の密度が小さいならば低次の摂動のみを考えれば良い事になる。しかし散乱ポテンシャル或いは不純物の密度が大きくなるともはや普通の摂動は使えなくなる。少くとも低次の摂動だけでは駄目である。そこで多くの散乱ポテンシャルを如何に取扱うべきかという問題が生ずる。低次の摂動のみでなく高次のものをも取れば良いのではないかともいえるが散乱の摂動計算は散乱体が1個の時でも、S波, P波……と足していく事は容易でない。まして散乱ポテンシャルが多数になり互いに相関するようになると高次の摂動を普通の方法で求める事は至難の技である。又摂動を表わす級数が必ず収斂するという保証はない。

現在の所、このような系を取扱う方法は大別して2つあるように思われる。その1つは local な波動函数の振舞は考えずに、エネルギースペクトルを求めるものである。この有力な手段はグリーン函数法¹⁾である。これによると特定の摂動を無限次迄寄せ集める事が出来、エネルギー密度又は格子点の近くの電子密度を求めることが出来る。しかし、格子点の近くの波動函数の値は求められないので、系の微妙な諸性質を Self-consistent な意味に於て求める事が出来ないように思われる。他の1つは波動函数を摂動としてではなく、部分的に構成していく方法である。いわば local から全体を見る行き方である。この有力な手段として Transfer matrix¹⁾の方法がある。波動

広田 徹

函数を Matrix を通じて両隣で繋ぎ合させるわけである。一次元の時にはこのようにして波動函数を作ると node counting¹⁾ 其他によつてエネルギー密度を求めることが出来る。しかし三次元への拡張となると可成り困難な問題を控えているように著者には思われる。実用化するには、出来れば波動函数の解析的な表現が望まれるのだが、transfer matrix 方法によると matrix の積が現れる。これが著者には厄介のように感じる。

この論文では local の波動函数の解析的表現を得る為に積分方程式の iteration を計算し、その級数を、落す項無しに全部評価する事を試みる。又解は積分常数又は任意函数を入れて解きこれを最後に境界条件によつて決めるようにする。即ち境界条件を付けずに波動函数の性質がどの程度決定せられるかという事に注意を向ける。境界条件を始めから導入しないと、解を容易に求め得る場合が存在する。iteration の級数は δ 函数ポテンシャルの時には母函数を使つて残らず集めることが出来る。Volterra 及 Fredholm の積分方程式両方について議論するが Fredholm の積分方程式は容易に三次元へ拡張出来るように思う。(論文(II))。iteration を評価する事により周期格子では Bloch wave 解が得られ、又格子間隔の分布函数が与えられている時には近似解が得られる。このようにして得られた解は廻りの格子点からの波の寄与を集めた形をしている。この解は格子点の分布函数を用いて local の意味に於いて表現する事が出来る。

§ 2 iteration (Volterra の積分方程式)

一次元の線上に並んだポテンシャル場に対する、一電子 Schrodinger 方程式は、解が或点の近傍で知られているならば第 2 種の Volterra 積分方程式に直す事が出来る。又その解は逐次近似で正確に求められ、解を表わす級数は収斂する事が知られている。

Schrodinger 方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi + k^2 \Psi = U \Psi \quad (1)$$

但し $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ $U = \frac{2m}{\hbar^2} \sum V(x-x_i)$ (2)

k が実数の時は正のエネルギー状態、虚数の場合は負のエネルギー状態を表わす。 $\Sigma v(x-x_1)$ は格子によるポテンシャルを表わし、 Σ は格子点についてとられるものとする。

(1) を積分方程式に変換して

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \frac{1}{k} \int_0^x \sin k(x-\xi) U(\xi) \psi(\xi) d\xi \quad (3)$$

となる。 $\psi_0(x)$ は Schrödinger 方程式の $x=0$ の近傍に於ける解である。

又 $\frac{1}{k} \sin k(x-\xi) U(\xi)$ は積分方程式の格を表わす。 iteration により

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \psi_0(x) + \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^x d\xi_1 \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \cdots \int_0^{\xi_{n-1}} d\xi_n \left(\frac{1}{k} \sin k(x-\xi_1) U(\xi_1) \right. \\ & \times \frac{1}{k} \sin k(\xi_1-\xi_2) U(\xi_2) \cdots \frac{1}{k} \sin k(\xi_{n-1}-\xi_n) U(\xi_n) \psi_0(\xi_n) \end{aligned} \quad (4)$$

$\psi_0(x)$ は格子点をのぞく点で

$$\psi_0(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (5)$$

と書ける。又ポテンシャルを δ 函数型

$$V(x-x_1) = \kappa_0 \delta(x-x_1) \quad x_1 ; \text{格子点} \quad (6)$$

とすると

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^n \{ A F_1(x, n) + B F_0(x, n) \} \quad (7)$$

となる。

$$F_0(x, n) = \sum_{x_1} \cdots \sum_{x_n} \sin k(x-x_1) \cdots \sin k(x_n-0) \quad (8)$$

$$F_1(x, n) = \sum_{x_1} \cdots \sum_{x_n} \sin k(x-x_1) \cdots \sin k(x_{n-1}-x_n) \cos k(x_n-0)$$

上式の $\sum_{x_i}$ は x_i を $0 \sim x_{i-1}$ の間のすべての格子点について和をとる事を意味する。

広田 徹

§ 3 周期格子

格子間隔 a の周期場を考える。 $0 - \varepsilon$, $x - \varepsilon$ に格子点がある様に 0 , x をとる。 ($\varepsilon \ll a$) $x = Na$ としよう。すると

$$F_0(x, n) = F_0(Na, n) = \sum_{N_1} \cdots \sum_{N_{n+1}} \sin N_1 ka \cdots \sin N_{n+1} ka \quad (9)$$

$$N_1 + \cdots + N_{n+1} = N \quad ka \neq m\pi$$

上級数を求める為に、次の母函数を定義すれば y^N の係数は F_0 を与える。

$$G_{F_0}(y, n) = \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} y^s \sin ska \right\}^{n+1} = \left(\frac{y \sin ka}{1 - 2y \cos ka + y^2} \right)^{n+1} \quad (10)$$

$$|y| < 1$$

従つて

$$F_0(Na, n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{y^{n+1} \sin^{n+1} kady}{y^{N+1} (1 - 2y \cos ka + y^2)^{n+1}} \quad (11)$$

となる。 $F_0(Na, 0) = \sin Nka$ となるのはすぐわかる。この F_0 により

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^n F_0(Na, n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\frac{k}{\kappa_0} \varphi(y) dy}{y^{N+1} (1 - \varphi(y))} \quad (12)$$

とまとめる事が出来る。 $\varphi(y)$ は

$$\varphi(y) = \frac{\frac{\kappa_0}{k} y \sin ka}{1 - 2y \cos ka + y^2} \quad (13)$$

によつて与えられる。又

$$\cos aa = \cos ka + \frac{\kappa_0}{k} \sin ka \quad (14)$$

によつて a を定義すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^n F_0(Na, n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{y \sin kady}{(y - e^{iaa})(y - e^{-iaa}) y^{N+1}} \quad (15)$$

$$= \frac{\sin ka}{\sin aa} \sin Na$$

次に $F_1(Na, n)$ に対する母函数

$$G_{F_1}(Na, n) = \left(\sum_{p=1}^{\infty} y^p \sin pka \right)^n \left(\sum_{q=0}^{\infty} y^q \cos qka \right) \quad (16)$$

を定義すると

$$F_1(Na, n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{y^n \sin^n ka (1 - y \cos ka)}{y^{N+1} (1 - 2y \cos ka + y^2)^{n+1}} dy \quad (17)$$

と書ける。 $F_1(Na, 0) = \cos Nka$ をみる事は容易である。前と同様に

$$\begin{aligned} \sum \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^n F_1(Na, n) &= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\frac{\kappa_0}{y} \varphi(y) (1 - y \cos ka)}{y^{N+1} (1 - \varphi(y) y \sin ka)} dy \\ &= \frac{\sin(N+1) \alpha a}{\sin \alpha a} - \frac{\sin N \alpha a}{\sin \alpha a} \cos ka \end{aligned} \quad (18)$$

従つて

$$\psi(Na) = A \left\{ \frac{\sin(N+1) \alpha a}{\sin \alpha a} - \frac{\sin N \alpha a}{\sin \alpha a} \cos ka \right\} + B \frac{\sin N \alpha a}{\sin \alpha a} \quad (19)$$

(14)は Kronig Penney relation であり、 α が real か imaginary かにより、振動解、指数解に分れる。

更に $\psi(x)$ より $\psi(Na)$ を求め $\psi(0) = \psi(Na)$, . $\psi(0) = \psi(Na)$ を課せば A/B , α (real)が決まり、固有値 k が得られる。これは所謂 Bloch wave である。

§ 4 非周期格子

格子間隔が分布函数 ψ により与えられる場合を考えよう。

$x \gg a$ (a : 平均間隔) とすると次の平均操作が考えられる。

$$\begin{aligned} F_0(x, n) &= \sum \cdots \sum \sin k(x - x_1) \cdots \cdots \sin k(x_{n-1} - x_n) \sin k(x_n - 0) \\ &\quad \Downarrow \\ F_0(x, n) &= \sum \cdots \sum \langle \sin k(x - x_1) \rangle \cdots \langle \sin k(x_{n-1} - x_n) \rangle \langle \sin k(x_n - 0) \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

$\langle - \rangle$ は分布函数による平均である。上式を求め、波動函数を得る為に

$$h_s(p) = \int_0^{\infty} \sin k(t_1 + \cdots + t_s) x(t_1) \cdots x(t_s) e^{-p(t_1 + \cdots + t_s)} dt_1 \cdots dt_s \quad (21)$$

広田 徹

$$h'_s(p) = \int_0^\infty \cos k(t_1 + \dots + t_s) x(t_1) \dots x(t_s) e^{-p(t_1 + \dots + t_s)} dt_1 \dots dt_s$$

を定義する。すると近似方式として次の三つが考えられる。

1) $0 \sim x$ の間の格子点数に制限なし

この場合

$$\overline{F_0(x, n)} = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \left(\sum_{s=1}^{\infty} h_s(p) \right)^{n+1} e^{px} dp \quad (22)$$

$$\overline{F_1(x, n)} = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \left(\sum_{s=1}^{\infty} h_s(p) \right)^n \left(\sum_{s=0}^{\infty} h'_s(p) \right) e^{px} dp \quad (23)$$

上式で Γ は $x(t)$ の規格化の条件が両端が固定している故多少影響を受ける事により生じたものであり $\Gamma \sim a$ の大きさを持つ。

従つて

$$\Psi(x) = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{A \sum h_s(p) + B \sum h'_s(p)}{1 - \frac{\kappa_0}{k} \sum h_s(p)} e^{px} dp \quad (24)$$

として、単一積分として与えられる。

2) $0 \sim x$ の間の格子点数 $N = \frac{x}{a}$ = 一定の条件をつけてみよう。この場合

$$h h_s(p) = h_s^{(1)}(p) + h_s^{(2)}(p) \quad (25)$$

$$h_s^{(1)} = \frac{1}{2i} \int e^{ik(t_1 + \dots + t_s) - p(t_1 + \dots + t_s)} x(t_1) \dots x(t_s) dt_1 \dots dt_s \quad (26)$$

$$h_s^{(2)} = \frac{1}{2i} \int e^{ik(t_1 + \dots + t_s) - p(t_1 + \dots + t_s)} x(t_1) \dots x(t_s) dt_1 \dots dt_s$$

を定義し、母函数

$$\left[\sum h_s^{(1)}(p) \lambda^s - \sum h_s^{(2)}(p) \lambda^s \right]^{n+1} \quad (27)$$

$$i \left[\sum h_s^{(1)}(p) \lambda^s - \sum h_s^{(2)}(p) \lambda^s \right]^n \left[\sum h_s^{(1)}(p) \lambda^s + \sum h_s^{(2)}(p) \lambda^s \right] \quad (28)$$

を作り、計算すると

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A i (\sum h_1^{(1)}(p) + \sum h_1^{(2)}(p) + B (\sum h_1^{(1)}(p) - \sum h_1^{(2)}(p)))}{(h_1^{(1)}(p) h_1^{(2)}(p))^{N+1/2}} \frac{\sin N \theta}{\sin \theta} e^{ipx} dp \quad (29)$$

の結果が得られる。 θ は

$$\cos \theta = h_1^{(1)}(p) + h_1^{(2)}(p) + \frac{\kappa_0}{ki} \{ h_1^{(1)}(p) - h_1^{(2)}(p) \} \quad (30)$$

で与えられる。

3) 近似の改良

x の近くの格子点を次第に平均操作からはずしていく事が考えられる。

$\overline{F(x, n)}$ の表現を

$$\begin{aligned} 0 \text{ 次} \quad & \sum \dots \sum \langle \sin k(x - x_1) \rangle \dots \dots \langle \sin k(x_n - 0) \rangle \\ 1 \text{ 次} \quad & \sum \dots \sum \sin k(x - x_1) \langle \sin k(x_1 - x_2) \rangle \dots \dots \langle \sin k(x_n - 0) \rangle \\ 2 \text{ 次} \quad & \sum \dots \sum \sin k(x - x_1) \sin k(x_1 - x_2) \langle \sin k(x_2 - x_3) \rangle \dots \dots \langle \sin k(x_n - 0) \rangle \end{aligned} \quad (31)$$

次数を上げていくと $\overline{F(x, n)}$ は x の近くの格子点の配列に Sensitive になることは明らかである。

この方針で近似方式 1) を改良すると

$$\begin{aligned} 1 \text{ 次} \quad \psi(x) = \sum_{x_1} \left[\sum \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^n \{ A \overline{F_1(x', n)} + B \overline{F_0(x', n)} \} \right] \frac{\kappa_0}{k} \sin k(x - x_1) \\ + A \cos kx + B \sin kx \end{aligned} \quad (32)$$

の表現が得られる。この式は

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \sum_{x_1=0 \sim x} \frac{\kappa_0}{k} \sin k(x - x_1) \overline{\psi(x_1)} \quad (33)$$

を意味し、 $\overline{\psi(x_1)}$ として近似方式 1) を入れたものである。同様にして

$$\begin{aligned} 2 \text{ 次} \quad \psi(x) = \psi_0(x) + \sum_{x_1=0 \sim x} \frac{\kappa_0}{k} \sin k(x - x_1) \overline{\psi(x_1)} \\ + \sum_{x_2} \sum_{x_1} \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^2 \sin k(x - x_1) \sin k(x_1 - x_2) \overline{\psi(x_2)} \end{aligned} \quad (34)$$

広田 徹

として近似を高めていけば次第に精度の高い波動関数が得られる事になる。
これらは配置についての分布関数で表わしてもよいだろう。

先づ近似方式1)で Random 格子を取扱ってみよう。

[Random 格子]

格子間隔の分布関数 $x(x)$ を求めてみよう。(分布が Random でも平均密度が与えられていると分布関数を持つ)

n 個の格子点を $x=0 \sim L$ の間に挿入し、Random な配置をとらせるとき、 x_i と x_{i+1} の間隔が x である確率は

$$x(x) = \frac{\int_0^L dx_n \int_0^{x_n} dx_{n-1} \cdots \int_0^{x_2} dx_1 \delta(x_1 - x_{i+1} - x)}{\int_0^L dx_n \int_0^{x_n} dx_{n-1} \cdots \int_0^{x_2} dx_1}$$

$$= \frac{n}{L} \left(1 - \frac{x}{L}\right)^{n-1}$$
(35)

ここで $n \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ $\frac{L}{n}$ とすると

$$x(x) = \frac{1}{a} e^{-\frac{x}{a}}$$
(36)

となる。この $x(x)$ を使い

$$\sum_{s=1}^{\infty} h_s(p) = \frac{ka}{p^2 a^2 + k^2 a^2}, \quad \sum_{s=0}^{\infty} h'_s(p) = \frac{pa}{p^2 a^2 + k^2 a^2}$$
(37)

(24)に入れて

$$\Psi(x) = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Apa + Bka}{p^2 a^2 + k^2 a^2 - \kappa_0 a} e^{px} dp$$

$$= A \frac{\Gamma}{a} \cos \sqrt{k^2 - \frac{\kappa_0}{a}} x + B \frac{k \Gamma}{a \sqrt{k^2 - \frac{\kappa_0}{a}}} \sin \sqrt{k^2 - \frac{\kappa_0}{a}} x$$
(38)

となる。この Ψ の単位長さ当りの node の数は

$$\frac{1}{\pi} \sqrt{k^2 - \frac{\kappa_0}{a}}$$
(39)

となり、これは δ 関数ポテンシャルをならした時の plane wave の node 数と考える事が出来る。(29)は Optical 近似として、 $k^2 - \frac{\kappa_0}{a} \gg 0$ の場

合によく計算機の結果と一致する。

(28) より $k^2 - \frac{\kappa_0}{a} > 0$ の時は振動解、 $k^2 - \frac{\kappa_0}{a} < 0$ の場合は指数解となるわけである。近似方式 2) によると

$$\psi(x) = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{A p a + B k a}{\{(1+pa)^2 + k^2 a^2 - \kappa_0 a\}^{x/2a+1}} \frac{\sin(\frac{x}{a}-1)\theta}{\sin \theta} e^{px} dp \quad (40)$$

$$\text{但} \quad \cos \theta = \frac{1 + p a}{\sqrt{(1+pa)^2 + k^2 a^2 - \kappa_0 a}} \quad (41)$$

となる。

又近似方式 3) によると

$$\begin{aligned} \psi(x) = & A \cos kx + B \sin kx \\ & + \frac{\Gamma \kappa_0}{a k} \sum_{x_1} (A \cos r x_1 + B \frac{k}{r} \sin r x_1) \sin k(x-x_1) \end{aligned} \quad (42)$$

$$r = \sqrt{k^2 - \frac{\kappa_0}{a}}$$

となり、或る配列に従つて上の級数和を求めればよい事になる。数値的取扱いは次に廻そう。

〔液体格子〕

$x(t)$ として Gaussian をとると、方式 1) により

$$x(t) = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\beta(t-a)^2} \quad (43)$$

$$\phi(x) = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{\left[A \frac{1}{2}(h'_1 + h''_1 - 2h'_1 h''_1) + \frac{1}{2i}(h'_1 - h''_1)\right] e^{px}}{(1-h'_1)(1-h''_1) - \frac{\kappa_0}{k} \frac{1}{2i}(h'_1 - h''_1)} dp$$

$$h'_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} e^{-\beta a^2} \frac{(p-2a\beta-ik)^2}{4\beta} \operatorname{Erfc}\left[\frac{1}{2}\beta^{-\frac{1}{2}}(p-2a\beta-ik)\right] \quad (44)$$

$$h''_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} e^{-\beta a^2} \frac{(p-2a\beta+ik)^2}{4\beta} \operatorname{Erfc}\left[\frac{1}{2}\beta^{-\frac{1}{2}}(p-2a\beta+ik)\right]$$

となる。 Erfc は Gauss の誤差函数である

広田 徹

§ 5 iteration (Fredholm の積分方程式)

Schrödinger 方程式に対する通常 Fredholm の積分方程式は、境界条件を満たす unperturbed 波動函数及びグリーン函数を使用する。しかしこの積分方程式は固有解を求める場合は斉次形であり、今迄のような iteration は出来ない。又、最初から境界条件を云々するのは方針と反する。従つて次の形をとろう。

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int_0^L \frac{\sin k|x-\xi|}{2k} U(\xi) \psi(\xi) d\xi \quad (45)$$

$\psi_0(x)$ は $U(x)=0$ の時の解であり、 $U(x)$ は δ 函数型として

$$\psi_0(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (46)$$

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{x_i} \kappa_0 \delta(x-x_i) \quad (46)$$

上式が Schrödinger 方程式を満足するのは明らかである。核の形及び積分範囲が Volterra の場合と少し異なる。(k が虚数の時は $\sin k|x-\xi|$ $\sin k|x-\xi| \rightarrow e^{-k|x-\xi|}$ とする。 iteration により

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{2k}\right)^n \{ A E_1(x,n) + B E_0(x,n) \} \quad (47)$$

$$E_0(x,n) = \sum \cdots \sum \sin k|x-x_1| \cdots \sin k|x_n-0| \quad (48)$$

$$E_1(x,n) = \sum \cdots \sum \sin k|x-x_1| \cdots \sin k|x_{n-1}-x_n| \cos k|x_n-0|$$

となる。上式の $\sum$ は x_i の各々について独立に $0 \sim L$ 迄の範囲の格子点についてとられるものとする。

$x=0 \sim L$ に制限して上の和を求めるのは大変であるから (反射壁が2つあるときの Markov chain の問題)、 $L \rightarrow \infty$ にして和を求めよう。

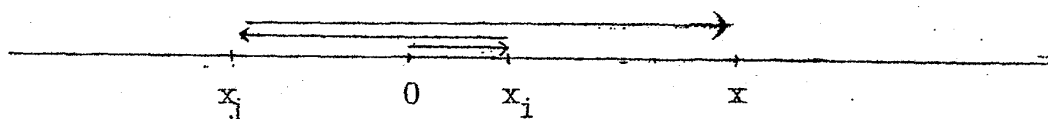


Fig. 1

§ 6 周期格子

$$E_0(qa, n) = \sum_{N_1} \cdots \sum_{N_{n+1}} \sin |N_1| ka \cdots \sin |N_{n+1}| ka \quad x = qa \quad (49)$$

$$ka \neq m\pi$$

この場合 N_1 の和についての制限はない。 N_1 は $-\infty$ から $+\infty$ 迄の整数値をとり得る。

母函数

$$G_{E_0}(y, n) = \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} \sin ska (y^s + y^{-s}) \right\}^{n+1} \quad (50)$$

を定義すると y^q の係数が $E_0(qa, n)$ を与えることになる。上の級数は $y = e^{i\varphi}$ の時以外は完全に発散し意味がない。そこで意味のある場合を考えよう。

$$G_{E_0}(y, n) = \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} 2 \sin ska \cos s\varphi \right\}^{n+1}$$

$$= \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} \{ \sin s(ka + \varphi) - \sin s(ka - \varphi) \} \right\}^{n+1} \quad (51)$$

この級数は超函数の意味で収斂する。¹⁾

$$= \left\{ \frac{1}{2} \left\{ \cot \frac{ka + \varphi}{2} + \cot \frac{ka - \varphi}{2} \right\} \right\}^{n+1}$$

$$= \left\{ \frac{\sin ka}{\cos \varphi - \cos ka} \right\}^{n+1}$$

これを iteration に入れ、級数和を求め $y^p = e^{iq\varphi}$ の係数を求める。

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{2k} \right)^n E_0(qa, n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{y^{q+1}} \frac{\sin ka d(e^{i\varphi})}{\cos \varphi - \cos ka - \frac{\kappa_0}{2k} \sin ka}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{y \sin ka dy}{y^{q+1} (y^2 - (2 \cos ka + \frac{\kappa_0}{k} \sin ka) y + 1)}$$

$$= \frac{\sin qa}{\sin a} \quad (52)$$

広田 徹

$$2 \cos ka + \frac{\kappa_0}{k} \sin ka = 2 \cos \alpha a \quad (53)$$

又 $E_1(qa, n)$

$$E_1(qa, n) = \sum \cdots \sum \sin N_1 ka \cdots \sin N_n ka \cos N_{n+1} ka \quad (54)$$

に対する母函数は

$$G_{E_1}(y, n) = \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} \sin Ska (y^s + y^{-s}) \right\}^n \left\{ \sum_{s=0}^{\infty} \cos Ska (y^s + y^{-s}) \right\} \quad (55)$$

となる。右辺の終りの級数は超函数の意味で収斂する。

$$\sum_{s=0}^{\infty} (2 \cos Ska \cos S\varphi) = \sum_{s=0}^{\infty} \{ \cos S(ka + \varphi) + \cos S(ka - \varphi) \} \quad (56)$$

$$= 1 + \pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\delta(ka + \varphi - 2\pi n) + \delta(ka - \varphi - 2\pi n) \right]$$

δ 函数が利いて来る φ の値は併く。すると

$$= 1$$

$$\text{従つて } G_{E_1}(y, n) = \left(\frac{\sin ka}{\cos \varphi - \cos ka} \right)^n \quad (57)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{k} \right)^n E_1(qa, n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{y^2 - 2 \cos ka \cdot y + 1}{y^{N+1} \{ y^2 - (2 \cos ka + \frac{\kappa_0}{k} \sin ka) y + 1 \}} dy \quad (58)$$

$$= \frac{\sin(N-1) \alpha a - 2 \cos ka \sin N \alpha a + \sin(N+1) \alpha a}{\sin \alpha a} \quad (59)$$

(52), (59) より φ が決まる。A, B のとり方により Bloch wave となる。

§ 7 非周期格子

Volterra の場合の取扱いを踏襲する。但し Laplace 変換の代りに Fourier-cosine 変換を行なう。

$$J_S(p) = 2 \int_0^{\infty} \sin k(t_1 + t_2 + \cdots t_S) \cos p(t_1 + t_2 + \cdots t_S) x(t_1) \cdots x(t_S) dt_1 \cdots dt_S \quad (60)$$

$$J'_S(p) = 2 \int_0^\infty \cos k(t_1 + \dots + t_S) \cos p(t_1 + \dots + t_S) x(t_1) \dots x(t_S) dt_1 \dots dt_S$$

を定義し、Volterra の場合と同じ近似様式に従う。

近似 1)

$$\overline{E_0(x, n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{s=1}^{\infty} J_s(p) \right)^{n+1} e^{-ipx} dP \quad (61)$$

$$\overline{E_1(x, n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{s=1}^{\infty} J_s(p) \right)^{n+1} \left(\sum_{s=0}^{\infty} J'_s(p) \right) e^{-ipx} dP$$

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa_0}{2k} \right)^n \{ A \overline{E_1(x, n)} + B \overline{E_0(x, n)} \} \\ &= \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A \sum J_s(p) + B \sum J'_s(p)}{1 - \frac{\kappa_0}{2k} \sum J_s(p)} e^{-ipx} dP \end{aligned} \quad (62)$$

により与えられる。

近似 2) を通り越して近似 3) へ行くと

1st

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \sum_{x_1=-\infty}^{\infty} \frac{\kappa_0}{2k} \sin k|x - x_1| \overline{\psi(x_1)} \quad (63)$$

これは各ポテンシャルからの波（定常波）を寄せ集めて波動函数が構成されている事を示す。

〔Random 格子〕 近似方式 1) によれば

$$\sum J_s(p) = \frac{2ka}{-p^2 a^2 + k^2 a^2}, \quad \sum J'_s(p) = \frac{2Pa}{-p^2 a^2 + k^2 a^2} \quad (64)$$

が得られ、Volterra の場合と全く同じ波動函数が出て来る。

§ 7 結

次の問題がある。

1) 三次元への拡張——これは Fredholm の積分方程式から形式的には容易である。

広田 徹

2) 近似の改良 — 近似方式 3) より出来る。

3) δ 函数ポテンシャルより山型及井戸型ポテンシャル又一般ポテンシャルへの一般化 これは可成り困難を予想させる。

以上の様な観点に基き、もう少し一般的な議論を論文〔II〕に於て行なう積りである。

Reference

- 1) H.M. James & A.S. Ginzburg, J. C. P. 57 (1953) 840
J. Hori & J. Asahi, Prog. Theor. Phys. 17 (1957) 523
M. Lax & J.C. Phillips, Phys. Rev. 110 (1958) 41
R.E. Borland, Prog. Phys. Soc. 78 (1961) 926
J.S. Faulkner & J. Korringa, Phys. Rev. 122 (1961) 390
H.L. Frisch & S.P. Lloyd, Phys. Rev. 120 (1960) 1175
A.P. Robert & R.E.B. Makinson, Prog. Phys. Soc. 79 (1962) 630
- 2) S.F. Edwards, Phil. Mag. 6 (1961) 617
H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 27 (1962) 811
- 3) 超函数入門 功力訳 共立出版社