

10月8日

時間を含まない問題（つづき）（松田博嗣，小野周，武野正三）

役に立つ話（戸谷富之）

将来計画

10月9日

計算の細かい点などの議論

研究会を通して活発な議論が展開され，また非線型振動，バクテリアの増殖，DNAなど種々の問題との関連も取り上げられたのはこのグループの特色の一つであると思われ，有意義でした。

次に Time-Dependent な問題と，Time-Independent な問題とに別けてやゝくわしい報告をすることにします。

Time-Independent Problems 堀 淳一（北大理）

Time-Independent な問題即ち不完全格子の振動数スペクトルと固有振動の波形の問題は，「不完全結晶の格子振動」研究会時代の当初から一貫して中心的なテーマの1つであり，現在まで種々研究がなされている。それにも拘らず，実際的な応用に寄与するためにはまだまだ多くのことがなされなければならないし，また未解決の原理的問題も数多くかゝっている現状である。

少数個の不純物を含む格子の局在振動に関しては，武野，寺本，柏村氏等の精力的な計算が行われて，問題は一応片附いたかのように見える。しかし実は今まで用いられて来たモデルは殆んどすべての場合最近接相互作用をもつ単純立方格子という over idealize されたものであつて，より realistic なモデルに対して理論を拡張する必要があること，即ち次近接相互作用を考慮に入れることや，より一般の結晶格子を取り扱うことの必要性が武野によつて指摘され，改めて認識された。これに関連して，さきに小寺が行

った酔歩の理論の局在振動への応用を一般の格子に拡張することの可能性が議論された。しかし一般的にいつて、問題の性質上、一度に大巾な解決をはかることは難しく、時間をかけることが必要であろう。

局在振動の問題でもう1つ重要なのは、surface mode 及び dislocation による localized mode の問題である。前者には表面に吸着された不純物の振動の問題も含まれる。何れも不純物が孤立していないである低次元の連続体を作っている場合であつて、ひつくるめて“extended impurity”の問題とよぶことが出来よう。この問題の実際上の重要性は以前から認識されていたのであるが、解析が困難なため今まであまり手がつけられていなかった。しかし最近一方では伝達行列の方法の高次元への拡張等これらの問題に有効に適用される可能性のある方法が開発されて来たことと、他方では世界的にこの種の問題に万々で手が染められ出していることから、積極的にこれと取り組もうという気運が動いて来た。Surface mode についてはすでに武野、朝日、堀などによつてそれぞれ Green 函数法、伝達行列法及び散乱行列法による取り扱いが提案されており、それらを具体的な対象に適用してゆくのが今後の課題である。Dislocation による localized mode の問題はまだ殆んど研究されていない状態であるが、最近欧米で手がつけられ出しているので、こちらでも強力に研究を進める計画が立てられている。

Disordered lattice の振動数スペクトルに関しては、多くの原理的な問題が未解決のまゝ残されている。その中最も重要と思われるのは、Dean 等が数値計算によつて得た、isotopic diatomic disordered lattice のスペクトルが高振動領域で多数の明瞭な peak をもつという結果を理論的に説明することである。これについては松田が高振動数領域では一般に非常に多数の固有振動数になり得ない振動数が存在することを証明して、スペクトルがそのような微細構造をもつことが決して不思議でないことを示した

が、一方堀と福島は伝達行列法の一変形であるベクトル描像の方法を用いてこれを説明することを試みて成功した。松田の定理と堀-福島の議論とで、少なくとも一次元に関する限り、微細構造が理論的に説明され、従つてこれらの peak は数値計算の際に用いられる格子が有限であるために生じた Spurious なものではないことが明らかになつたと考える。同様な議論が nonisotopic な場合や一般の多原子格子及び高次元の格子に対してもなりたつかどうかを研究することが今後の課題である。電子エネルギー・スペクトルの場合に同様の議論がなりたつかどうかをしらべることも、實際上重要であり、また randomness の種類によつてスペクトルがどう変るかという問題に関連して興味のある問題である。

以上の諸問題に共通な原理的問題としては、今まで用いられて来ている上述の3つの方法及び Dean 等の用いている "Negative-Factor-Counting" の方法の間の関係を論ずることや、散乱問題とスペクトルの問題との関係を論ずることが重要であろう。とくに散乱問題との関係は Time-Dependent な問題とも関係する興味ある問題であり、今回も福田及び朝日によつて立ち入つた議論がなされた。このためには in-band mode が不純物によつてどのように影響されるかをくわしく研究することが必要となるが、朝日は伝達行列によつて求めた in-band mode に対する解を通常の散乱形式の解と比較し、通常の解のもつ意味を明らかにする手がかりを与えた。なおこの問題に関連して、複素的な境界条件を研究する必要があることを堀が remark した。戸田は原理的問題の1つとして、非常に一般的な系に対して状態和を求める問題が行列の問題に帰着するが、この種の問題と伝達行列等とを統一的にとり扱えないかという問題を提出した。

今回の研究会の特徴は、基礎的な面に重点をおきながらも、実際問題に直接つながる面もより強化することの必要性が強調されたことである。このような問題の1つとして、最近殆んど研究されていない格子振動の熱力学的性質に及ぼす影響の問題を、例えばヘリウムの相転移に関連して再びとりあげ

る必要のあることが小野及び松田によつて強調された。また武野は格子力学の方法を spin wave, その他種々の excitation wave に対して適用する仕事を開始しつつあることをアナウンスした。戸谷は Pb の kohn effect を第 1 原理から出発して説明する試みを発表した。この研究は一方では格子振動理論の基礎のまた基礎にふれるものであり、日本ではこの種の研究が非常に貧しいことから、今後さらに発展させなければならない方向の 1 つであると思われる。

以上概観したように、Time-independent な問題に限つても、今後なすべきことが山積しており、スタッフの不足が痛感される。以上テーマを書き並べてみただけで、私のような栄養不良は息が切れる。この辺で筆をおかしていただくことにする次第である。

Time-independent Problems

松 田 博 嗣 (京大理)

不完全結晶の格子振動は結晶の完全な並進対称性からのずれが (I) 有限個の point defect によるか, (II) dislocation のような line defect によるか, (III) surface defect によるか, 乃至は (IV) 系が disordered lattice で無限個の point defect をもつ場合に分類されるであろう。又格子振動のモデルとして Born-Oppenheimer 近似の下で原子核の運動自由度だけを取り出し, 更に harmonic な力だけを考えるか, 或は anharmonicity をも考慮するか, それとも原子核の運動自由度だけでなく電子等他の自由度との相互作用も explicit に取り入れる等あるであろう。

そもそも理論の究極の目的が自然現象に対する広汎な信頼し得る予言可能性にあるならば, そこへの過程としてわれわれの考察するモデルが一般的, 現実的なものであり, しかもそのモデルについての考察の結論が不透明な仮