

不純物振動数の上下限を求める新しい方法

北大理 藤田 武彦

(11月19日受理)

§ 1. Introduction

Dean¹⁾は同位原子不純物を含む格子の不純物振動数の非常によい上下限を“defect region”の固有値問題を解くことによって計算する公式を求めた。ここではかなり多数の場合に彼の公式によるよりもよい上下限をdefect regionの固有値問題を解くことなしに、しかも比較的簡単な計算で求める新しい方法を提出する。

ここでも不純物を含んだ小領域を“defect region”，それ以外の領域を“regular region”と呼ぶことにする。まずこれら2つの領域の間の相互作用を切り離し，その後改めてこれらの領域間に相互作用を入れることを考える。TodaとKogure²⁾はこの操作を1つの直交変換によって行ない，この変換を行なったあとの運動方程式で記述される系を“Model S”と呼んだ。Model Sの運動方程式から全系の正しい固有振動数を与える分散関係式が導かれる。我々はこれから出発して不純物振動数に対する上下限を種々の方法で求める。1個の同位原子不純物を含む1次元格子の不純物振動数の上下限を，最近接相互作用および次近接相互作用の場合につき，defect regionの大きさを変え，まだいくつかの異なる方法によって求め，これらをDeanの方法によって得られる値と比較した。その結果，多くの場合Deanの方法によるよりもよい値が得られること，及びDeanの方法が適用できない2，3の場合に対しても我々の方法は用いる事ができ，しかも非常によい上下限が得られることがわかった。我々の方法はdefect regionの固有モードを計算することなく，従って電子計算機を使用せずに解析的に上下限を求める事ができるという特徴をもっている。

この論文においては1次元格子のみをとり扱った。2，3次元の格子の場合には，S-model に対する secular matrix をあらわに求めることが困難

であるという難点があるが，不純物振動数の上下限を求める際にはこれらの具体的な値や形は必ずしも必要でないから，同様な方法が適用される可能性は十分あると思われる。

§ 2. Toda - Kogure 変換と分散式

まず最初に最近接相互作用をもつ1次元格子を考える。2N+1個の原子のうち中央の0番目のものが軽い不純物であるとする。行列形式で書いた運動方程式は次のようである。

$$M\ddot{u} + Ku = 0 \quad (1)$$

ここで M は質量行列，

$$M = \begin{pmatrix} M & & & & \\ & M & & & \\ & & M' & & \\ & & & M & \\ & & & & M \\ & O & & & & O \end{pmatrix} \quad (2)$$

は相互作用行列，

$$K = \begin{pmatrix} -2K & K & & & \\ K & -2K & K & & \\ & K & -2K & K & \\ & & K & -2K & K \\ & & & K & -2K \\ & 0 & & & & O \end{pmatrix} \quad (3)$$

である。これは次のように書きかえられる：

$$\ddot{X} + AX = 0 \quad (4)$$

但し,

$$X = M^{\frac{1}{2}} u = \begin{pmatrix} x_{-N} \\ \vdots \\ x_0 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$A = M^{-\frac{1}{2}} K M^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 2r_1 & -r_1 & & & \\ -r_1 & 2r_1 & & & \\ & & 2r_1 & -r_1' & \\ & & -r_1' & \omega_0^2 & -r_1' \\ & & & -r_1' & 2r_1 \\ & & & & & -r_1 & 2r_1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

である。ここに

$$r_1 = \frac{K}{M}, \quad r_1' = \frac{K}{\sqrt{MM'}}, \quad \omega_0^2 = \frac{2K}{M'}. \quad (7)$$

Toda と Kogure は更に対称な直交行列 を用いて直交変換を行なった:

$$X' = D X, \quad (8)$$

$$D = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin \frac{\pi N^2}{N+1} & \sin \frac{\pi N(N-1)}{N+1} \cdots \sin \frac{\pi N}{N+1} & & \\ \sin \frac{\pi (N-1)N}{N+1} & \sin \frac{\pi (N-1)^2}{N+1} \cdots \sin \frac{\pi (N-1)}{N+1} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sin \frac{\pi N}{N+1} & \sin \frac{\pi (N-1)}{N+1} \cdots \sin \frac{\pi}{N+1} & & \\ & & & & \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin \frac{\pi 1.1}{N+1} & \sin \frac{\pi 1.2}{N+1} & \cdots \\ \sin \frac{\pi 2.1}{N+1} & \sin \frac{\pi 2.2}{N+1} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \sin \frac{\pi (N-1)}{N+1} & \sin \frac{\pi (N-2)}{N+1} & \cdots \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (9)$$

これは不純物それ自身を defect region, のこりを regular region と考えた時, regular region の固有モードを導入することによって行列 A を部分的に対角化することを意味する。即ち運動方程式は,

$$\ddot{X}' + D A D X = 0, \quad (10)$$

$$D A D = \begin{pmatrix} \omega_{-N}^2 & 0 & A_{-N} & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{-1}^2 & A_{-1} & 0 & 0 \\ A_{-N} & A_{-1} & \omega_0^2 & A_1 & A_N \\ 0 & A_1 & \omega_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & A_N & 0 & 0 & \omega_N^2 \end{pmatrix} \quad (11)$$

となる。これをあらわに書き下すと,

$$\begin{cases} \ddot{X}_s + \omega_s^2 X_s + A_s X_0 = 0 & (s = -N \cdots -1; 1 \cdots N) \\ \ddot{X}_0 + \omega_0^2 X_0 + \sum_s' A_s X_s = 0 & (s \neq 0) \end{cases} \quad (12)$$

但し ω_s は regular region の, ω_0 は defect region の, 何れも固定端境界条件の下での固有振動数である。 A_s は S model における2つの領域間の相互作用を表わす:

$$\begin{cases} \omega_s^2 = 4 r_1 \sin \frac{2\pi s}{2(N+1)} \\ A_s = \sqrt{\frac{2}{N+1}} r_1' \sin \frac{\pi s}{N+1} \end{cases} \quad (s = -N_1 \cdots -1; 1 \cdots N) \quad (13)$$

(12)より全系の固有振動数 Ω^2 に対する分散式

$$\Omega^2 = \omega_0^2 + \sum_s' \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} \quad (\neq 0) \quad (14)$$

が得られる。

次近接相互作用を考慮に入れると，相互作用行列は次のようになる：

$$r = r_1 + r_2, \quad r_1 = \frac{K}{M}, \quad r_2 = \frac{K'}{M}, \quad r_1' = \frac{K}{\sqrt{MM'}}, \quad r_2' = \frac{K'}{\sqrt{MM'}},$$

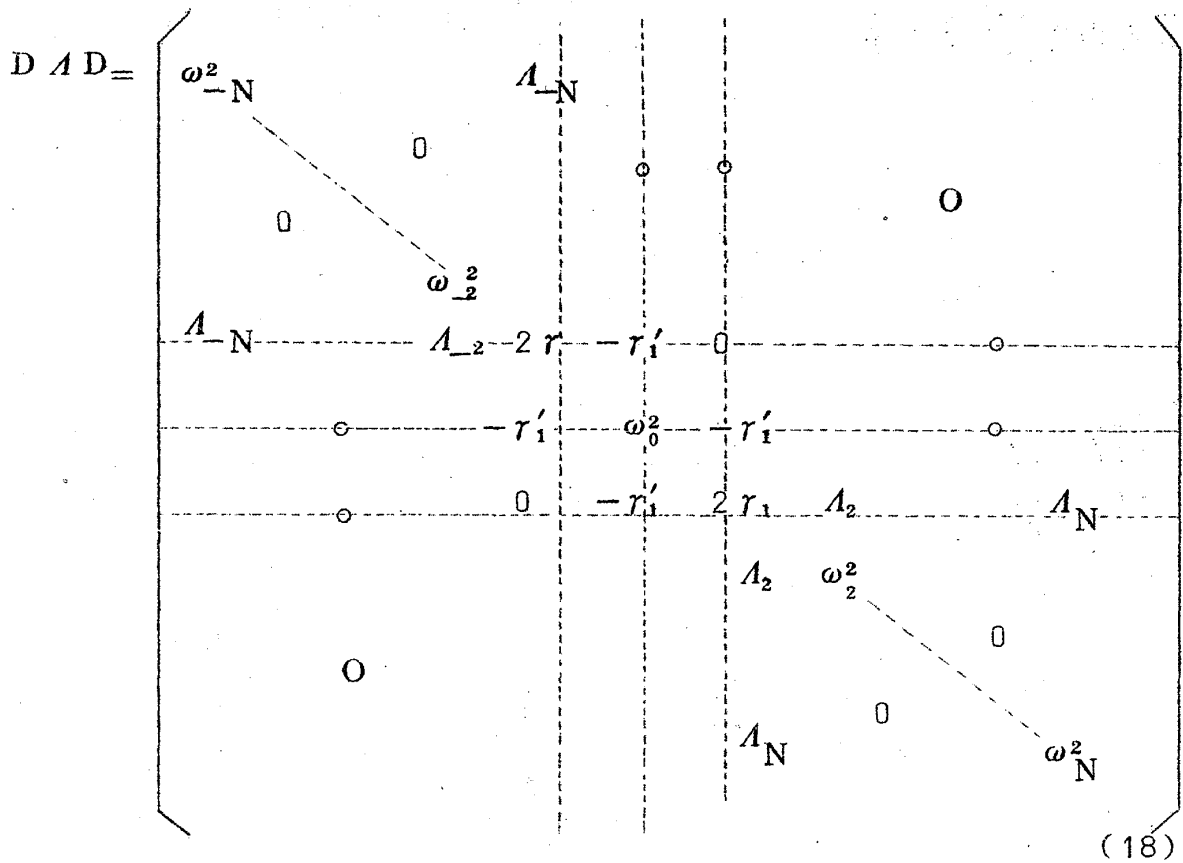
$$\omega_0^2 = \frac{2(K+K')}{M'} \quad (16)$$

Toda-Kogure変換を行なったあとの行列 DAD は最近接相互作用のときと同じ形をもつが, parameter A_s, ω_s^2 が次のように変わる:

$$\omega_s^2 = \sum_{n=1}^2 2 r_n (1 - \cos \frac{\pi n s}{N+1})$$

$$A_s = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^2 r'_n \sin \frac{\pi n s}{N+1} \quad (17)$$

次に defect region として，不純物を中心とする 3 個の原子をとってみよう。このとき Toda-Kogure 変換の行列は 3 行 3 列の恒等変換を含むものになる。最近接相互作用の場合には，変換された行列は



運動方程式は

$$\left\{ \begin{array}{l} \ddot{X}_s + \omega_s^2 X_s + A_s X_1 = 0 \\ \ddot{X}_{-s} + \omega_{-s}^2 X_{-s} + A_{-s} X_{-1} = 0 \end{array} \right\} \quad (s=2 \cdots N)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \ddot{X}_1 + 2r_1 X_1 - r_1' X_0 + \sum_{s=2}^N A_s X_s = 0 \\ \ddot{X}_{-1} + 2r_1 X_{-1} - r_1' X_0 + \sum_{s=-2}^{-N} A_s X_s = 0 \\ \ddot{X}_0 + \omega_0^2 X_0 - r_1' X_{-1} - r_1' X_1 = 0 \end{array} \right. \quad (19)$$

となる。これから全系の固有振動数に対する分散公式

$$\Omega^2 = \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - \left(\sum_{s=2}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} + 2r_1 \right)} \quad (20)$$

が得られる。但し ω_0 は $\frac{2K}{M'}$ で、

$$\begin{cases} \omega_s^2 = 2r_1 \left(1 - \cos \frac{\pi s}{N+1}\right) \\ A_s = \sqrt{\frac{2}{N+1}} r_1 \sin \frac{2\pi s}{N+1} \end{cases} \quad (21)$$

である。同様にして、次近接相互作用の場合には変換される行列は

$$D A D = \begin{array}{ccccccc} & & & \lambda_{-N} & A_{-N} & & \\ \omega_{-N}^2 & & & & & & \\ & 0 & & & & & \\ & & \omega_{-2} & \lambda_{-2} & A_{-2} & 0 & 0 \\ & & & & & & \\ \lambda_{-N} & & \lambda_{-2} & 2r_1 & -r'_1 & -r_2 & 0 \\ A_{-N} & & A_{-1} & -r'_1 & \omega_0^2 & -r'_1 & A_2 \\ & & & & & & \\ & 0 & & -r_2 & -r'_1 & 2r_1 & \lambda_2 \\ & & & & A_2 & \lambda_2 & \omega_2^2 \\ & & & & & & \\ & & & & A_N & \lambda_N & \\ & & & & & & \omega_N^2 \end{array} \quad (22)$$

運動方程式は、

$$\begin{cases} \ddot{X}_s + \omega_s^2 X_s + A_s X_0 + \lambda_s X_1 = 0 \\ \ddot{X}_{-s} + \omega_{-s}^2 X_{-s} + A_{-s} X_0 + \lambda_{-s} X_{-1} = 0 \end{cases} \quad (s=2 \dots N)$$

$$\begin{cases} \ddot{X}_{-1} + 2r X_{-1} - r'_1 X_0 - r_2 X_1 + \sum_{s=-2}^{-N} \lambda_s X_s = 0 \\ \ddot{X}_0 + \omega_0^2 X_0 - r'_1 X_{-1} - r'_1 X_1 + \sum_{s \neq 0} A_s X_s = 0 \\ \ddot{X}_1 + 2r X_1 - r'_1 X_0 - r_2 X_{-1} + \sum_{s=2}^N \lambda_s X_s = 0 \end{cases} \quad (23)$$

分散式は

$$\Omega^2 = \omega_0^2 + 2 \sum_{s=2}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} + 2 \times \frac{\left(r'_1 - \sum_{s=2}^N \frac{A_s \lambda_s}{\Omega^2 - \omega_s^2}\right)^2}{\Omega^2 - \left(r_0 + \sum_{s=2}^N \frac{\lambda_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2}\right)}$$

となる。但し、

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_s^2 = \sum_{n=1}^2 2 r_n (1 - \cos \frac{n \pi s}{N+1}) \\ A_s = \sqrt{\frac{2}{N+1}} r'_2 \sin \frac{2 \pi s}{N+1} \\ \lambda_s = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^2 r_n \sin \frac{(n+1) \pi s}{N+1} \end{array} \right. \quad (25)$$

である。

§ 3. 不純物振動数の上下限に対する種々の方法

Defect region と regular region の間の相互作用がない時のそれぞれの固有振動数は Rayleigh の定理によって、全系の正しい固有振動数より小さい。従って defect region と regular region の相互作用を切ったときの前者の固有振動数を正しい不純物振動数に対する 0 次の下限として用いることができる。これを出発点として Iterative な方法、又は不等式を直接解く方法によって次第によい上下限を求めてゆくのである。以下 defect region の大きさと、相互作用の range のいくつかの組み合わせに対して、この操作を実例によって示そう。簡単のために不純物を中心とする n 個の原子を defect region としてとったということを“ n 個くりぬき”と表現することにする。

〔1〕 最近接相互作用，1 個くりぬきの場合

方法 α_1

1) 全系の正しい固有振動数に対する分散関係式はこのとき次のようである。

$$\Omega^2 - \omega_0^2 = 2 \sum_{s=1}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2}$$

以下 Ω は不純物準位に対する全系の正しい固有振動数と考える。

2) (12) からわかるように A_s は defect region と regular region の間の相互作用を表わす。従って 2 つの領域の間の相互作用を切ることで ($A_s \rightarrow 0$)，正しい不純物準位の下限として defect region の最大の固有振動数が求められる。これは Dean の方法によって得られる下限 (σ_1 で表わ

す) に一致する。

$$\Omega^2 > \omega_0^2 = \sigma_1 \quad (26)$$

3) 次に級数和内の Ω^2 を上のようにして得られた下限で, ω_s^2 を regular region の最大の固有振動数 ω_m^2 で置き代えることによって Ω^2 に対する上限を得る。

$$\Omega^2 < \omega_0^2 + \frac{2 \sum_{s=1}^N A_s^2}{\sigma_1 - \omega_m^2} = \omega_0^2 + \frac{2 r_1'^2}{\sigma_1 - \omega_m^2} = \tau \quad (27)$$

ここで,

$$\sum_{s=1}^N A_s^2 = \frac{2}{N+1} r_1'^2 \sum_{s=1}^N \sin\left(\frac{\pi s}{N+1}\right) = r_1'^2 \quad (28)$$

を用いた。

この上限は Dean の方法から得られる上限 (τ で表わす) に一致する。方法 α_1 は従って [1] の場合 Dean の方法と等価である。

方法 α_2

級数和の各項の Ω^2 をそのままとし ω_s^2 を ω_m^2 でおきかえると,

$$\begin{aligned} \Omega^2 &= \omega_0^2 + 2 \sum_{s=1}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} \\ &< \omega_0^2 + \frac{2 r_1'^2}{\Omega^2 - \omega_m^2} \end{aligned} \quad (29)$$

これを解いて

$$\begin{aligned} \Omega_1^2 &< \Omega^2 < \Omega_1^2 + \frac{\omega_0^2 + \omega_m^2}{2} \pm \frac{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega_m^2) + 8 r_1'^2}}{2} \\ \Omega_1^2 \pm &= \frac{\omega_0^2 + \omega_m^2}{2} \pm \frac{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega_m^2) + 8 r_1'^2}}{2} \end{aligned} \quad (30)$$

また級数和の中で $\omega_s^2 \rightarrow 0$ とすると

$$\Omega^2 > \omega_0^2 + \frac{2 \sum_{s=1}^N A_s^2}{\Omega^2} = \omega_0^2 + \frac{2 r_1'^2}{\Omega^2} \quad (31)$$

となる。これより

$$\begin{cases} \Omega^2 > \Omega_2^2 + , \quad \Omega^2 < \Omega_2^2 - \\ \Omega_{2\pm}^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \pm \frac{\sqrt{\omega_0^4 + 8 r_1'^2}}{2} \end{cases} \quad (32)$$

$\Omega_{1\pm}^2$, $\Omega_{2\pm}^2$ の間の大小関係が

$$\begin{cases} \Omega_2^2 - < \Omega_1^2 - < \Omega_2^2 + < \Omega_1^2 + \\ \Omega_2^2 + > \omega_0^2 , \quad \Omega_1^2 + \omega_m^2 \end{cases} \quad (33)$$

のように与えられるから、次の2つの場合が存在する：

i) $\Omega_2^2 + > \omega_m^2$ ($M' < \frac{5}{8} M = 0.625M$) のとき

$$\begin{cases} \Omega_2^2 + < \Omega^2 < \Omega_1^2 + \\ \Omega_2^2 + = \frac{\omega_0^2}{2} + \frac{\sqrt{\omega_0^4 + 8 r_1'^2}}{2} \\ \Omega_1^2 + = \frac{\omega_0^2 + \omega_m^2}{2} + \frac{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega_m^2)^2 + 8 r_1'^2}}{2} \end{cases} \quad (34)$$

但し、

$$\omega_0^2 = \frac{2K}{M'} , \quad r_1' = \frac{K}{\sqrt{MM'}}$$

である。

ii) $\Omega_2^2 + < \omega_m^2$ ($M' > 0.625M$) のとき

$$\omega_m^2 < \Omega^2 < \Omega_1^2 + \quad (35)$$

(34) (35) は方法 σ_1 によるよりもよい上下限を与える。

不純物の質量 M' が規則原子の質量 M に近づくにつれ Ω^2 は ω_m^2 に近い値をとる。このような場合には上に得られた上限はなおゆるすぎるであろう。更により上限を得るためには次のようにすればよい。 M' が小さくなるにつれ不純物の振動の局在化が強まるので 1 個くりぬきに対して与えられる近似的な不純物準位 ω_0 はその時正しい不純物準位 Ω に近づく。従って分散関係式の左辺は不純物の質量 M' に関する単調増加関数である。従って級数和の上限は左辺の $M' = M$ における値、下限は左辺の $M' = 0$ における値で与えられる。

$$0 \leq \sum_{s=1}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} \leq \frac{4r_1 - 2r_1}{2} = r_1 \quad (36)$$

従って M' が M に近いときは

$$\begin{aligned} \Omega^2 &\leq \omega_0^2 + 2r_1 \\ &= 2K \left(\frac{1}{M'} + \frac{1}{M} \right) \end{aligned} \quad (37)$$

の方がよい上限を与える。

〔2〕 最近接相互作用，3 個くりぬきの場合

方法 I

分散式はこの場合，

$$\Omega^2 = \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - \left(\sum_{s=2}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} + 2r_1 \right)} \quad (38)$$

である。(26) より右辺第 2 項は正でなくてはならない。ここで述べる方法は Iterative に下限から上限を更に上限から下限を求める方法である。両領域の相互作用を切ると

$$\Omega^2 > \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - 2r_1} \quad (39)$$

となる。これから下限として

$$\begin{aligned} \Omega^2 > \Omega_+^2 &= \frac{\omega_0^2 + 2r_1}{2} + \frac{\sqrt{(\omega_0^2 - 2r_1)^2 + 8r_1'^2}}{2} \\ &= \sigma_1 \end{aligned} \quad (40)$$

が得られる。次に上で得られた下限を用いて

$$\begin{aligned} \Omega^2 &< \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 \left(2r_1 + \frac{\sum_{s=2}^N A_s^2}{\sigma_1 - \omega_m^2} \right)} \\ &= \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 \left(2r_1 + \frac{r_1^2}{\sigma_1 - \omega_m^2} \right)} \end{aligned} \quad (41)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \sum_{s=2}^N A_s^2 &= \frac{2}{N+1} r_1^2 \sum_{s=2}^N \sin^2 \left(\frac{2\pi s}{N+1} \right) \\ &= r_1^2 \end{aligned} \quad (42)$$

を用いた。(41)が使えるための条件は

$$\Omega^2 > 2r_1 + \frac{r_1^2}{\sigma_1 - \omega_m^2} \quad (43)$$

である。(41)を解いて,

$$\left\{ \begin{aligned} \Omega^2 &< \Omega_{1+}^2 = \frac{\omega_0^2 + (2r_1 + \delta_1)}{2} \\ &\quad + \frac{\sqrt{\{\omega_0^2 - (2r_1 + \delta_1)\}^2 + 8r_1'^2}}{2} \\ \delta_1 &= \frac{r_1^2}{\sigma_1 - \omega_m^2} \end{aligned} \right. \quad (44)$$

が求まる。

Defect region の最大固有振動数の2乗 σ_1 が ω_m^2 に近づくにつれて(41)の右辺第2項の分母は零に近づくのでその時(44)で与えられる上限はゆるすぎるであろう。〔1〕の方法 α_2 の中で行ったのと同様に級数和

$$\sum_{s=2}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} \equiv \Sigma_1 \quad (45)$$

の上限を求めそれを用いて Ω^2 の良い上限を得ることができる。 Σ_1 の中の parameter は

$$\begin{cases} A_s = \sqrt{\frac{2}{N+1}} r_1 \sin \frac{2\pi s}{N+1} \\ \omega_s^2 = 2r_1 \left(1 - \cos \frac{\pi s}{N+1}\right) \end{cases}$$

であるから不純物に關与しない。従って級数和 Σ_1 は Ω^2 の単調減少関数、 M' の単調増加関数である。その最大値は $\Omega^2 = 4r_1$ ($M' = M$) のとき、最小値は $\Omega^2 \rightarrow \infty$ ($M' \rightarrow 0$) のとき得られる。

$$\begin{aligned} \Sigma_1 \max = \Sigma_1 M' = M &= \left(\Omega^2 - 2r_1 - \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - \omega_0^2} \right)_{M'=M} \\ &= r_1 \end{aligned} \quad (46)$$

$$\Sigma_1 \min = \Sigma_1 M' \rightarrow 0 \rightarrow 0 \quad (47)$$

従って

$$0 \leq \sum_{s=2}^N \frac{A_s^2}{\Omega^2 - \omega_s^2} \leq r_1 \quad (48)$$

これを用いて Ω^2 の2次不等式、及びその解として Ω^2 の上限が得られる。

$$\Omega^2 < \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - (2r_1 + r_1)} = \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - 3r_1} \quad (49)$$

$$\Omega^2 < \Omega_{1+}^2 = \frac{\omega_0^2 + 3r_1}{2} + \frac{\sqrt{(\omega_0^2 - 3r_1)^2 + 8r_1'^2}}{2} \quad (50)$$

これは σ_1 が $\omega_m^2 = 4r_1$ に近い値をとるとき有効な上限である。

上限 Ω_{1+}^2 を用いると σ_1 より更に良い下限が得られる。

$$\Omega^2 > \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - (2r_1 + \frac{r_1^2}{\Omega_1^2 +})} \quad (51)$$

これより,

$$\begin{aligned} \Omega^2 > \Omega_+^2 &= \frac{\omega_0^2 + (2r_1 + d_1)}{2} + \frac{\sqrt{\{\omega_0^2 - (2r_1 + d_1)\}^2 + 8r_1'^2}}{2} \\ &\equiv \sigma_2 \end{aligned} \quad (52)$$

但し,

$$d_1 = \frac{r_1^2}{\Omega_1^2 +} \quad (53)$$

である。また下限 σ_2 を用いると

$$\Omega^2 < \omega_0^2 + \frac{2r_1'^2}{\Omega^2 - (2r_1 + \frac{r_1^2}{\sigma_2 - \omega_m^2})} \quad (54)$$

$$\Omega^2 < \Omega_+^2 = \frac{\omega_0^2 + (2r_1 + \delta_2)}{2} + \frac{\sqrt{\{\omega_0^2 - (2r_1 + \delta_2)\}^2 + 8r_1'^2}}{2} \quad (55)$$

が得られる。但し,

$$\delta_2 = \frac{r_1^2}{\sigma_2 - \omega_m^2} \quad (56)$$

である。この上限が Ω_+^2 より良い上限として使えるのは M' が M に比べてかなり小さい時である。 M' が M に近い時は Ω_+^2 がこの方法で得られた最良の上限である。

同様にして、次近接相互作用の場合にも、1個くりぬきの場合には〔1〕の場合の α_1, α_2 に対応する方法を用いることにより、又3個くりぬきの場合には〔2〕の場合の I に対応する方法を用いることによって、不純物振動数に対する厳密な上下限を求めることができる。

§ 4. Dean の方法及び上述の方法によって得られる上下限の数値的比較

以上述べた諸方法によって求めた上下限と Dean の方法（以下 β とかく）によって得られるものとを比較すると次のようである。各表において， L は Ω^2 の下限， U は Ω^2 の上限を意味し，また $\Omega^2 \text{ est} = \frac{L+U}{2}$ ， $\Delta \Omega^2 = \Omega^2 \text{ exact} - \Omega^2 \text{ est}$ ， $\Delta = U - L$ である。

〔 1 〕 最近接相互作用，1 個くりぬきの場合

$$(1) M' = \frac{1}{4} M \text{ のとき}$$

$$\omega^2 = 8$$

$$\Omega^2 \text{ exact} = 9.142857$$

	L	U	$\Omega^2 \text{ est}$	$\Delta \Omega^2$	Δ
α_2	8.898982	9.464102	9.181542	-0.038685	0.565120
α_1, β	8.	10.	9.	0.142857	2.

$$(2) M' = \frac{1}{1.44} M \text{ のとき}$$

$$\omega_0^2 = 2.88$$

$$\Omega^2 \text{ exact} = 4.411915$$

	L	U	$\Omega^2 \text{ est}$	$\Delta \Omega^2$	Δ
α_2	4.	4.880000	4.440000	-0.028085	0.880000
α_1, β	—	—	—	—	—

〔 2 〕 最近接相互作用，3 個くりぬきの場合

$$(1) M' = \frac{1}{4} M \text{ のとき}$$

	L	U	$\Omega^2 \text{ est}$	$\Delta \Omega^2$	Δ
I	$\sigma_1 = 9.123106$	$\Omega_{1+}^2 = 9.150244$	9.136675	0.006182	0.027138
	$\sigma_2 = 9.138163$	$\Omega_{2+}^2 = 9.150163$	9.144163	-0.001306	0.012000
	$\sigma_3 = 9.138163$				
β	9.123106	9.149691	9.136399	0.006458	0.026585

(2) $M' = \frac{1}{1.44} M$ のとき

	L	U	Ω^2 est	$\Delta \Omega^2$	Δ
I	$\sigma_1=4.193169$	$\Omega^2_+=4.638117$	4.444948	-0.033033	0.444948
	$\sigma_2=4.277067$	$\Omega^2_+=4.638117$	4.457592	-0.045677	0.361050
β	4.193169	6.131953	5.162561	-0.750640	1.938784

[3] 次近接相互作用, 1個くりぬきの場合 ($K/K=1/4$)。

(1) $M' = \frac{1}{4} M$ のとき

$\omega_0^2 = 10$

Ω^2 exact = 10.940000

	L	U	Ω^2 est	$\Delta \Omega^2$	Δ
α_2	10.787920	11.183300	10.985610	-0.045610	0.395380
α_1, β	10.	11.416667	10.708334	-0.248334	1.416667

(2) $M' = \frac{1}{1.44} M$ のとき

$\omega_0^2 = 3.6$

Ω^2 exact = 4.776073

	L	U	Ω^2 est	$\Delta \Omega^2$	Δ
α_2	4.309980	5.100000	4.704990	0.071083	0.790020
α_1, β	-	-	-	-	-

[4] 次近接相互作用, 3個くりぬきの場合 ($K/K=1/4$)。

(1) $M' = \frac{1}{4} M$ のとき

	L	U	Ω^2 est	$\Delta \Omega^2$	Δ
I	$\sigma_1=10.922460$	$\Omega^2_{1+}=10.965302$	10.943881	-0.003881	0.042842
	$\sigma_2=10.926848$	$\Omega^2_{2+}=10.965302$	10.946075	-0.006075	0.038454
β	10.922460	10.942277	10.932369	0.007631	0.019817

(2) $M' = \frac{1}{1.44} M$ のとき

	L	U	Ω^2 est	$\Delta \Omega^2$	Δ
I	$\sigma_1=4.751370$	$\Omega^2_+=5.100000$	4.925685	-0.149612	0.348630
	$\sigma_2=4.322997$				
β	4.751370	5.023779	4.887575	-0.111502	0.272409

これらの表より次のような結論が得られる：

最近接相互作用の場合は1個くりぬきのときにも，3個くりぬきの時にも Dean の方法によるよりも1桁良い結果が得られた。Dean の方法では上限が

$$\tau = \omega_0^2 + \frac{\varepsilon_1^2}{\sigma_1 - \omega_m^2}$$

で与えられる。 M' が M に近づくと σ_1 は ω_m^2 に近づき従ってこれは良い上限を与えない。我々の方法ではこのような事態が分散関係式の中の級数和に対する厳密な上限を用いることによってさけられており，その結果不純物の質量が規則原子の質量に近い程良い上限が得られる。また，1個くりぬきに対しては Dean の方法の使えない場合 ($\sigma_1 = \omega_0^2 < \omega_m^2$) に対しても上の方法は有効であることが分る。

次近接相互作用の場合には，1個くりぬきに対しては我々の方法は最近接相互作用の時と同様の利点をもつ。3個くりぬきの場合には分散式が複雑となるために不純物の質量が規則原子の質量に接近した場合 Dean の方法の結果より良い上限を得るのが困難となる。

§ 5. 結 論

以上で，少くとも上に扱ったモデルに関する限り，我々の方法は多くの場合 Dean の方法よりもよい不純物振動数の上下限を与えることが示された。但し，Dean の方法は defect region を大きくとる程上下限の精度がよくなるという特徴をもつのに反して，我々の方法においては defect region を大きくとることが必ずしも精度の改良と結びつかない。しかし実際問題としては高々有効数字3桁目まで一致した上下限を得れば十分であり，その範囲においては多

くの場合 Dean のそれよりよい値が得られるのである。Introduction に述べたように、我々は defect region の固有モードを計算することなしに解析的に上下限を求めることができるという特長をもっている。この論文では 1 次元の場合のみをとり扱ったが、2, 3 次元に対しても同様な方法が定式化できる見込みである。

この問題を suggest された堀淳一先生、激励をたまわった Dean 博士、および有益な討論をして下さった合田正毅さんほか北大物性理論研究室の方々に厚くお礼申し上げます。

文 献

- 1) P. Dean, J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.) 1 (1968) 22.
- 2) M. Toda and Y. Kogure, Prog. Theor. Phys. Suppl. 23 (1962) 157.