

Title	無秩序な1次元格子における穴ぼこだらけの状態密度
Author(s)	宮島, 佐介
Citation	大阪大学低温センターだより. 16 P.5-P.8
Issue Date	1976-10
Text Version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/11094/12429
DOI	
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

無秩序な1次元格子における 穴ぼこだらけの状態密度

工学部 宮島佐介 (吹田 4677)

不純物を極く僅かに含む系の素励起のスペクトル(以下では単にスペクトルと呼ぶ)については、実験的にも、理論的にも相当の程度調べられているが、不純物が可成り多くなった場合や、どちらが不純物だか母体だか区別の出来なくなった様な無秩序系のスペクトルの分析は、困難な点が多く大部分は未解決である。しかしながら、特性周波数、又は特性エネルギー(意味は後述)については、厳密な議論が展開されており、最近の発展もあるので、それらについて述べるつもりです。

そもそも、事の起りは1960年に英国のDeanが無秩序な1次元格子の振動系で構成原子の質量比又それらの間に作用するバネ定数の比をいろいろに変化させ、計算機でスペクトルを求めた事にあるが、その中に、その時迄に近似的に得られていたスペクトルと非常に異なっていて凹凸の激しい、しかも、状態密度の完全に消える箇所(これが前出の特性周波数、又は特性エネルギーである。)の存在する事が示された。図1は2種類の原子からなる

無秩序1次元格子の振動スペクトルで、質量比(m_1/m_2)が3、バネ定数は一定、 m_2 なる質量の原子の濃度を0.1とした時の計算機による結果(実線)とグリーン関数法によりしかも自己無撞着に解かれた結果(点線)とを模式的に示したものである。縦軸は状態密度、横軸はエネルギーの2乗である。結果は一目瞭然、後者の方法の近似の程度がどれ位かを良く示している。しかしながら、前者の方法も有限個の原子からなる鎖に対する計算であるから、この結果がどこ迄正しいか、保証の限りではない。

この疑問の一部に答えたのが、堀松田であり¹⁾彼等は一般化したSaxon-

Hutnerの定理を得、具体的な例の1つとして、同位元素(バネ定数が同じ)で、質量比が2以上ならば $\omega_b/4$, $\omega_b/3$, $3\omega_b/8$, ……の周波数では、どんな風に原子を並べても、もちろん濃度にも無関係に、状態密度が零となることを示した。ここで、 ω_b は軽い方の原子がつくる1次元格子の最大の周波数である。この特性周波数が存在することは、以下の議論から大体の事が推定される。まず、 m_1 ,

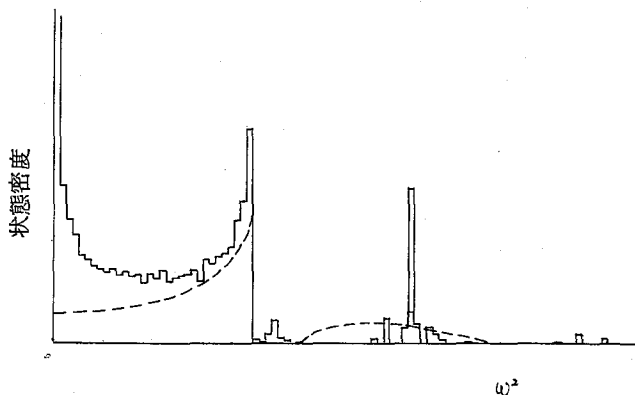


図1. 無秩序1次元格子の振動スペクトル
実線は計算機、点線はグリーン関数
による結果である。縦軸は任意スケ
ールで実線と点線の相対的な高さは
意味がない。

m_2, m_1, m_2, \dots と原子が並ぶとき、スペクトルは音響枝と光学枝の2つのバンドに分かれ、その間にギャップを存在させることが出来る。次に、 $m_1, m_2, m_2, m_1, m_2, m_2, \dots$ と原子を並べると、3つのバンドに分かれ、その間に2つのバンドギャップが出来る。この様につきつぎと周期を延すと、ギャップの数が増加する。しかし、適当な条件を満たせばすべての模型のギャップが重なる様になるかも知れない。それが実現化されたものが、とりもなおさず、上述の特性周波数であり、その条件を厳密に表現したものが、一般化された Saxon-Hutner の定理である。しかし、実際には同位元素で質量比が2以上になる元素はなく、特性周波数は理論上の結論であった。

それでは、バネ定数も異なる場合はどうであろうか？、実験可能な領域の比をもつ元素が存在するかどうかの問題である。解析は遷移行列が unimodular でなくなるため、複雑になるので、詳細を省略し結果のみを示すと図2の様になる。²⁾ 図の縦軸は臨界値、横軸は $1/a$ を、黒点に添えてある数字は b の値を意味する。このとき、特性周波数の波数は $b\pi/a$ で与えられる。

(図3, 図4についても同様。)ここでは、2原子A, Bが無秩序に並んで1次元振動系を構成すると考え、A-A, B-B, A-B間のバネ定数を2, 1及び1.5とした。図中の黒点より大きい質量比ならば特性周波数が出現する。特に、 $K_{A-A}=2$ の様にバネ定数が大きい場合には $m_2/m_1 \sim 1$ の値でも、特性周波数が存在し得ることが重要である。又、軽い原子が有限個数以下しか連続して並ばないときは、特性周波数が巾を持つ様になると言う事実を考え合せると、その観測がより容易になると思われる。

さらに、軽い方の原子の濃度を p とすると、軽い方の原子が S 個連続して並ぶ確率は p^S に比例して、 S の増加と共に急激に減少するはずである。この事から特性周波数の周辺の状態密度の上限が

$$p \left[\cot^{-1} \left\{ (m_2/m_1 - 1) \tan \sin^{-1} \omega/\omega_b - 1 \right\} \right] / 2 \sin^{-1} \omega/\omega_b - 1$$

に比例する事が導びかれる。³⁾

以上は、2種類の原子の無秩序1次元格子の振動のスペクトルについて述べてきたが、次元を高める

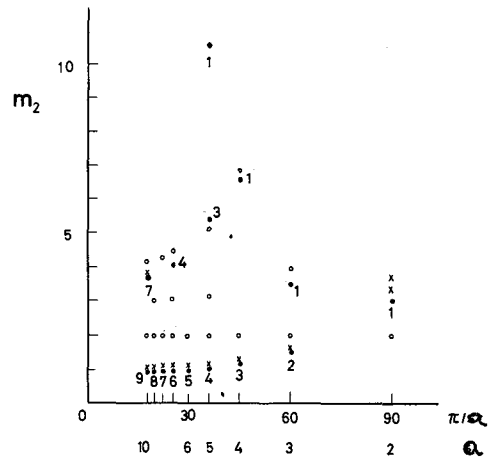


図2. 波数 $b\pi/a$ が特性周波数となるための m_2 の臨界値 (黒点) 黒い点の横に添えてある数字は b で x は、一般化された Saxon-Hutner の定理を満たさない点である。白丸は同位元素の場合の結果である。

ことや、他の系への適用もいろいろ考えられている。⁴⁾ 例えば、有機物中の電子状態の理論で出てくるHuckel近似(模型)、強さがランダムな δ 型のポテンシャルをもつKronig-Penney modelやランダム強磁性体のスピン波理論などにも適用されている。最後のランダム強磁性体については、最近著者が少し調べたので簡単に述べる。

スピン系では交換積分とスピンの大きさがパラメータであり、それらは大体振動系のバネ定数と質量が対応するのであるが、厳密にはそうでなく、唯、スピンの大きさが同じで、格子点 i と j にあるスピンの間の交換エネルギーに異方性がある場合、 $E_{ex} = J^x S_i^x S_j^x + J^y S_i^y S_j^y + J^z S_i^z S_j^z$ と書けるときの、 J^z のみに無秩序性が存在すれば、前述の堀、松田らに依る同位元素のみで構成された無秩序な1次元格子の振動の問題と同類となり、 $|J_1^z - J_2^z|$ が $J^\perp (=J^x=J^y)$ の6倍以上である事が特性エネルギー出現のための条件となる。一方、スピン系の場合には $J_1 (J_1^x=J_1^y=J_1^z)$ と $J_2 (J_2^x=J_2^y=J_2^z)$

が無秩序に並ぶ系や、スピンの大きさが無秩序である場合が重要で、しかも興味がある。この系も遷移行列が unimodular でなくなるため、少々計算の複雑さが増すので詳細を省き、結果のみを示す。図3はスピンの大きさが同じで交換作用は等方的な場合の J_1/J_2 の臨界値を示すもので、 $J_1/J_2 > (J_1/J_2)_c$ では特性エネルギーが出現する。又図4は $J_1 = 2, J_2 = 1$ としたとき、スピ

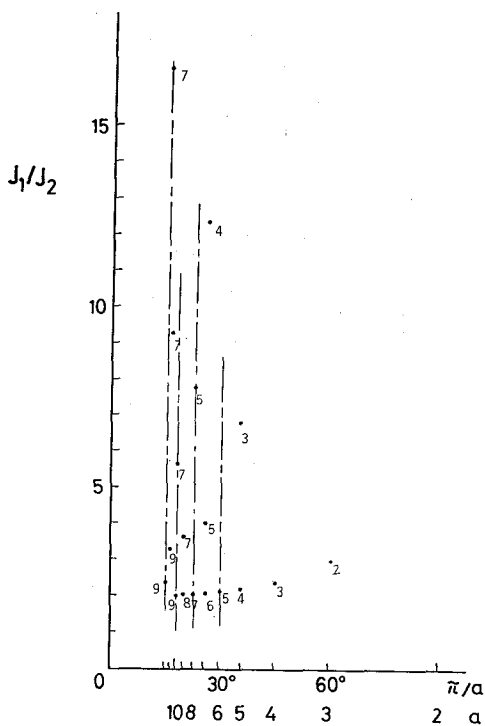


図3. 波数 $b\pi/a$ が特性エネルギーとなるための J_1/J_2 の比に対する臨界値
aは横軸で、bは黒点に添えた数字で表わされている。

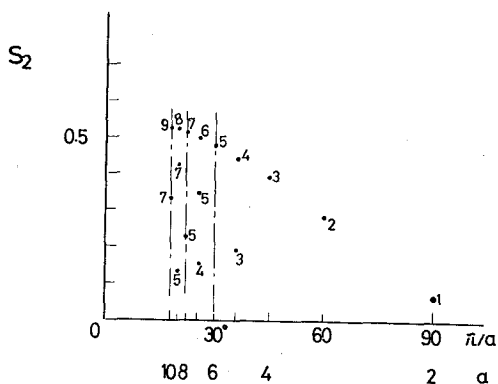


図4. 波数 $b\pi/a$ が特性エネルギーとなるための S_2 の臨界値
図3の説明参照

ンの大きさの比がどれ位から特性エネルギーが出現するかを示している。これらの図から分子様に、特性エネルギー出現のために必要な交換積分の比も、スピンの大きさの比も2~3の附近に存在する。従ってこれらの条件を満たす無秩序な強磁性体を作り、穴ぼこだらけの状態密度の観測の可能性があるとされる。

- ① J.Hori, International Series of Monographs in Natural Philosophy "Spectral Properties of Disordered Chains and Lattices" (Pergamon Press).
- ② S.Miyazima, Prog. Theor. Phys. **53** (1975), 929.
- ③ " and H.Matsuda, unpublished.
- ④ ①の参考文献を参照
- ⑤ S.Miyazima, Prog. Theor. Phys. **53** (1975), 601.

シンポジウム "超電導応用機器の大型化に伴う諸問題"

主催 低温工学協会

日時 11月11日 午後1時20分より4時40分

場所 大阪大学吹田図書館視聴覚ホール

講演題目及び講師

1. ヘリウム資源とその確保

日大理工 安河内 昂 氏

2. 構成材料とマグネット設計

三菱電機中研 岩本雅民氏

3. 同上に関するコメント

電総研田無 小山健一氏

4. 冷凍機と冷却方式

電総研田無 秋山好胤氏

5. 同上に関するコメント

日立機械研 佐藤新太郎氏

6. 海外の実状

原子力研究所 島本進氏

このシンポジウムは大阪大学工学部で開催される第17回低温工学協会研究発表会の席で行われます。当シンポジウムは大阪大学の教職員、学生に無料で公開されます。