

## 不規則媒質中の波動伝搬におけるコヒーレント波の考え方

小田 垣 孝 〈科学教育総合研究所 t.odagaki@bk4.so-net.ne.jp〉

### 1. はじめに

音、電磁波、金属中の電子や格子振動など、多くの物理現象が波として記述される。不規則媒質中の波は、媒質中に存在する散乱体で何度も散乱され、物理的性質は、散乱波を含めた波を、散乱体の分布について平均したもので決定される。この平均された波はコヒーレント波とよばれ、多重散乱の方法を用いたその明確な定義が M. Lax によって与えられた。<sup>1,2)</sup> コヒーレント波の考え方は、コヒーレントポテンシャル近似の開発や不純物半導体のホッピング伝導の記述に用いられ、不規則系の性質を理解する理論的枠組みの形成に重要な役割を果たした。

筆者は、1979年3月からニューヨーク市立大学の M. Lax 教授<sup>3)</sup>の下で博士研究員として3年半共同研究し、Lax が関わってきた表題の研究の経緯を詳しく教わった。Lax の総説<sup>4)</sup>をベースに、Lax から聞いた話を交えて、コヒーレント波の考え方と不規則系の物理学におけるその応用例を概観する。また、同時期に、摂動展開をファインマン図形で表し、ファインマン図形の部分和から物理量を近似的に求める方法が開発されていたが、この方法との関係についても触れることにする。

### 2. 多重散乱とコヒーレント波

散乱体の存在する媒質中で、シュレディンガー方程式

$$\left(E - H_0 - \sum_j v_j\right) \Psi(\mathbf{r}) = 0$$

に従う波  $\Psi(\mathbf{r})$  を考える。  $E$  はエネルギー、  $H_0$  は散乱体がない場合のハミルトニアン、  $v_j = v(\mathbf{r}-\mathbf{j})$  は  $\mathbf{j}$  にある散乱体  $j$  によるポテンシャルエネルギーである。散乱体について平均した波が物理的性質を決めるが、Lax は平均した波  $\langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle$  をコヒーレント波とよび、コヒーレント波が

$$(E - H_0 - V_c) \langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle = 0$$

$$V_c = \sum_j \langle v_j \Psi^j \rangle / \langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle$$

の形の波動方程式を満たすことを厳密に示した。ここで

$$t_j = v_j + v_j (E - H_0)^{-1} t_j$$

は、散乱体  $j$  による散乱の遷移演算子、  $\Psi^j$  は散乱体  $j$  に入射する波を表す。  $V_c$  は後にコヒーレントポテンシャルとよばれるようになった。  $V_c$  は厳密には求められないので、何らかの近似が必要となる。例えば、散乱体  $j$  の入射波  $\Psi^j$  をコヒーレント波  $\langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle$  で近似すると、

$$V_c = \sum_j \langle t_j \rangle$$

となる。この近似は、有効場近似 (EFA) とよばれる。<sup>1)</sup>  $V_c$  を求める近似の仕方を工夫して、様々な近似法が提案されてきた。<sup>4)</sup>

### 3. 不純物状態

1950年代の半導体の研究の中で、置換型2元結晶や不純物を含む半導体などの電気伝導度や光吸収実験と直接関わる電子状態密度などに対する不規則性の効果が重要性が認識されていた。

Lax は J. C. Phillips と共同で、シミュレーションを用いて、デルタ関数型ポテンシャルが1次元上にランダムに配置された系の電子状態を求めた。<sup>5)</sup> デルタ関数型ポテンシャルを規則的に配置されたクローニツヒ-ベニーモデルの場合と異なり、結晶で見られるエネルギーバンドの端の特異性がなく、固有状態は結晶の場合のバンド幅を超えて広がり、テイルが存在することが示された。Lax は、博士研究員 J. R. Klauder にコヒーレント波の考え方をを用いてこの特徴を明らかにすることを提案した。Klauder は、場の理論で用いられていたファインマン図形の方法を応用して、コヒーレントポテンシャルを決めるいろいろな近似を考察し、シミュレーションとよく一致する近似法を見つけた。<sup>6)</sup>

半導体の不純物状態については、松原-豊沢がランダムに配置された水素原子の1s軌道電子の集団について、ファインマン図形を用いた摂動展開を行い、現れるファインマン図形の部分和をとる近似を導入した。<sup>7)</sup>

### 4. 合金の状態密度

Lax は、合金系の格子振動の研究を始めていた D. W. Taylor にコヒーレント波の方法を教え、また P. Soven には合金の電子状態の問題を研究テーマとして提案し、コヒーレント波を用いる方法を薦めた。<sup>4)</sup> この応用において、出発する波動方程式を

$$\left(E - H_0 - V_c - \sum_j \left[v_j - \frac{V_c}{N}\right]\right) \Psi(\mathbf{r}) = 0$$

のように、コヒーレントポテンシャルからのずれが摂動となるように取り、散乱体  $j$  の入射波をコヒーレント波と見なす近似により、平均の散乱の遷移

演算子がゼロになる条件から、コヒーレントポテンシャル $V_c$ を自己無撞着に求める方法が開発された。この近似によって求めた状態密度がシミュレーションとよく合うことが示され、この近似方法はコヒーレントポテンシャル近似 (CPA) とよばれるようになった。CPAが普及するきっかけとなった彼らの論文<sup>8,9)</sup>は、共にPhysical Reviewの1967年4月15日号に掲載されている。

米沢は、1964年の論文<sup>10)</sup>でKlauder<sup>6)</sup>および松原-豊沢<sup>7)</sup>のファインマン図形を用いた方法を詳細に比較検討し、松原-豊沢の方法とKlauderの最善の方法が等価であることを示した(後に、CPAと同じであることがわかった)。米沢は、松原と共にさらに系統的に詳細な解析を進め<sup>11)</sup>、CPAの定式を1968年に発表した<sup>12)</sup>。同時期に、小野寺-豊沢も同じ近似法を用いた合金系の電子状態の計算結果を発表している<sup>13)</sup>。

## 5. ホッピング伝導

コヒーレント波の考え方は、波動方程式だけでなく、ランダムウォークのマスター方程式にも用いられている。1960年代の早い時期に、不純物濃度の低い半導体の不純物伝導は、金属のようなバンド伝導ではなく、局在した電子のホッピングによる伝導になることが実験から示唆されていた。特に交流電気伝導度の実部が、振動数のべき関数に従った増加関数となっており、単純な金属で見られる振動数依存性と

は逆になることが発見され、その説明は大きな課題であった。Scher-Laxは、Montroll-Weissが定式化した連続時間ランダムウォーク (Continuous Time Random Walk, CTRW) の方法<sup>14)</sup>を用いて電子のホッピング運動を記述し、平均的 (コヒーレント) な確率波の時間変化を、ジャンプの待ち時間分布で記述する近似法を導入し、交流伝導度の振動数依存性を説明することに成功した<sup>15,16)</sup>。

筆者は、不規則なジャンプ率をもつマスター方程式に従う確率波に対して、そのコヒーレント波がコヒーレントなジャンプ率をもつマスター方程式に従うことを要請し、自己無撞着にコヒーレントなジャンプ率を求める近似法 (CMA) を開発した。CMAにより、ホッピング伝導の静的伝導度の不純物濃度依存性が説明された<sup>17)</sup>。

## 6. まとめ

Laxによって導入された不規則媒質中の波動をコヒーレント波で表す考え方は、相転移理論における平均場近似に対応するものである。特に、個々の散乱体に入射する波をコヒーレント波で近似し、コヒーレント波が伝播する媒質の平均 (コヒーレント) ポテンシャルを、その媒質に対する散乱が平均として消滅するという条件から自己無撞着に決める方法 (CPA) は、不規則系の状態密度を求める近似法として確立している。P. W. Andersonが1982年に行われたLaxの還暦記念シンポジ

ウムでの講演で明確に述べている<sup>18)</sup>ように、これらの発展にはLaxの多重散乱の方法とコヒーレント波の考え方がその基礎となっていることは紛れもない事実である。

## 参考文献

- 1) M. Lax, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 287 (1951).
- 2) M. Lax, *Phys. Rev.* **85**, 621 (1952).
- 3) M. Laxの業績などについてはJ. L. Birman, H. Z. Cummins, *Melvin Lax, A Biographical Memoir*, *Biographical Memoirs* **87** (The National Academies Press, Washington, D.C., 2005). <http://www.nasonline.org/publications/biographical-memoirs/memoir-pdfs/lax-melvin.pdf>を参照。
- 4) M. Lax, "STOCHASTIC DIFFERENTIAL EQUATIONS", *SIAM-AMS Proceedings* **VI**, 35 (1973).
- 5) M. Lax and J. C. Phillips, *Phys. Rev.* **110**, 41 (1958).
- 6) J. R. Klauder, *Ann. Phys.* **14**, 43 (1961).
- 7) T. Matsubara and Y. Toyozawa, *Prog. Theor. Phys.* **36**, 739 (1961).
- 8) D. W. Taylor, *Phys. Rev.* **156**, 1017 (1967).
- 9) P. Soven, *Phys. Rev.* **156**, 809 (1967).
- 10) F. Yonezawa, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 357 (1964).
- 11) F. Yonezawa and T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **35**, 357 (1966).
- 12) F. Yonezawa, *Prog. Theor. Phys.* **40**, 734 (1968).
- 13) Y. Onodera and Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **24**, 341 (1968).
- 14) E. W. Montroll and G. H. Weiss, *J. Math. Phys.* **6**, 167 (1965).
- 15) H. Scher and M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4491 (1973).
- 16) H. Scher and M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4502 (1973).
- 17) T. Odagaki and M. Lax, *Phys. Rev. B* **24**, 5284 (1981).
- 18) P. W. Anderson, in *CCNY Physics Symposium: In celebration of Melvin Lax's Sixtieth Birthday*, ed. H. Falk (CCNY Physics Department, 1983) pp. 1-14.

(2022年5月26日原稿受付)