

**Zeitschrift:** Helvetica Physica Acta  
**Band:** 36 (1963)  
**Heft:** VII

**Artikel:** Die Regularisierung der interpolierten Clusterentwicklung für die Eigenfrequenzverteilung einer ungeordneten binären Kette  
**Autor:** Schlup, W.  
**DOI:** <https://doi.org/10.5169/seals-113406>

#### **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

#### **Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

#### **Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

**Download PDF:** 18.01.2026

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>**

# Die Regularisierung der interpolierten Clusterentwicklung für die Eigenfrequenzverteilung einer ungeordneten binären Kette

von W. Schlup

Institut für Theoretische Physik der Universität Zürich

(21. VIII. 63)

*Zusammenfassung.* Die lokal negative Verteilungsdichte  $f(\omega^2)$  der Eigenfrequenzen von Gitterschwingungen einer isotopen linearen Kette wird in symmetrischer Weise in erster Ordnung in den beiden Konzentrationen interpoliert und in Form der komplexen Clusterentwicklung algebraisch regularisiert. Das Resultat wird bis auf die Willkür bei der Interpolation eindeutig aus der Wahrscheinlichkeitsbedingung  $f(\omega^2) \geq 0$  und dem Rayleigh-Theorem festgelegt.

## § 1. Einleitung

Die verschiedenen Methoden zur analytischen Berechnung der Eigenfrequenzverteilung eines ungeordneten Gitters lassen sich nach der Form des Ergebnisses in vier Gruppen zusammenfassen:

I. Exakte Lösungen: Sie sind nur für sehr spezielle Modelle bekannt (siehe Ref. DYSON (1), DOMB *et al.* (2), RUBIN, ZWANZIG (3)).

II. Mit Hilfe der Methode der Entkopplung von temperaturabhängigen Greenfunktionen gefundene Näherungslösungen, die ähnlich wie bei der Supraleitung gewisse wesentliche Singularitäten im Störparameter aufweisen und daher nicht durch eine analytische Störungstheorie erhalten werden können (siehe Ref. BONCH-BRUEVICH, TYABLIKOV (4)).

III. Verbesserte Methoden einer analytischen Störungstheorie, bei der für eine Lösung in 1. Ordnung Terme höherer Ordnungen mitberücksichtigt werden, sofern sie sich in einfacher Weise summieren lassen. Die Selektion derselben geschieht durch eine topologische Klasseneinteilung von Graphen, die in eindeutiger Weise den einzelnen Termen zugeordnet werden (siehe Ref. LANGER (5), TAKENO (6)). Unter diese Gruppe fallen auch die Resultate der Konfigurationsmitteilung (siehe Ref. MAHANTY (7), SCHLUP (8)).

IV. Ferner die Lösungen der einfachen analytischen Störungstheorie, die wegen ihrer physikalischen Interpretation als Clusterentwicklung bezeichnet wird. Ihr Term  $n$ -ter Ordnung wird durch Beiträge von Clustern aus  $n$ , bzw. weniger Störatomen im reinen Kristall mit Atomen einer geeignet gewählten mittleren Masse  $m_0$  bestimmt. Da die Konvergenz der Clusterentwicklung noch unbewiesen ist, kann man deren Resultate im Sinne einer asymptotischen Entwicklung, das heißt für sehr kleine Störparameter verwenden (siehe Ref. MONTROLL, POTTS (9), LIFSHITZ, STEPANOVA (10)).

In der vorliegenden Arbeit wird versucht, die selektive Summation der Störungsentwicklung mittels physikalischer Prinzipien aus der Clusterentwicklung zu bekommen. Wir legen unseren Betrachtungen ein spezielles Modell zu Grunde: Eine lineare Kette harmonisch an den nächsten Nachbarn gekoppelter Atome, deren Massen stochastische Größen sind, die unabhängig vom Gitterplatz die Werte  $m_1$  (Grundatom) bzw.  $m_2$  (Störatom) mit der Wahrscheinlichkeit  $p_1 = 1 - q$  bzw.  $p_2 = q$  annehmen. Wegen des Rayleigh-Theorems (siehe § 5) ist der Träger der Frequenzverteilungsdichte  $f(x)$  ( $x = \omega^2/4 K$ ,  $\omega$  Frequenz,  $K$  Kopplungskonstante) begrenzt. Die Clusterentwicklung lautet dann

$$f(x, q) = f_0(x) + q f_1(x) + q^2 f_2(x) + \dots, \quad (1.1)$$

wobei wegen der Normierung

$$\int f(x, q) dx = 1 \quad (1.2)$$

ist, und daher die Entwicklungskoeffizienten  $f_l(x)$  den Integralbedingungen

$$\int f_0(x) dx = 1, \quad \int f_l(x) dx = 0 \quad l = 1, 2, \dots \quad (1.3)$$

genügen müssen. Hierbei ist  $f_0(x)$  eine echte Verteilungsdichte, weil  $f_0(x) \geq 0$  ist, und kann daher als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden. Die Koeffizienten  $f_l(x)$  für  $l = 1, 2, \dots$  sind verallgemeinerte Funktionen, die als Imaginärteil des Randwertes einer analytischen Funktion definiert sind. Gleichung 1.1 wird daher nur über geeignete Testfunktionen gemittelt, das heisst als Distribution, einen Sinn machen. Aus der Eigenschaft 1.3 folgt, dass  $f_l(x)$  sowohl positive als auch negative Anteile besitzt. Das gleiche gilt für  $f_1(x)/f_0(x)$  solange  $f_0(x) \neq 0$  ist, das heisst im Innern des Grundbandes. Da, wie wir sehen werden (siehe Gleichung 3.5),  $f_1(x)/f_0(x)$  am oberen Rand des Grundbandes negativ unendlich wird, ist  $f(x, q)$  für noch so kleine  $q$  in der Nähe des oberen Randes negativ und kann nicht mehr als Wahrscheinlichkeit gedeutet werden. Diese Verteilungsdichte  $f(x, q)$  gibt trotzdem alle Momente, welche Polynome in  $q$  sind und die direkt nach der Montroll-Momentenmethode (siehe Ref. DOMB *et al.* (11)) berechnet werden können, richtig wieder. Es stellt sich nun das Problem, eine Verteilungsdichte  $f^{(l)}(x, q)$  mit begrenztem Träger und bezüglich  $q$  in eine Potenzreihe entwickelbarer Momente derart einzuführen, dass  $f(x, q)$  und  $f^{(l)}(x, q)$  in den Momenten

$$\overline{x^n}(q) = \overline{x_0^n} + q \overline{x_1^n} + \dots + q^l \overline{x_l^n} + O(q^{l+1}) \quad (1.4)$$

in  $O(q^{l+1})$  übereinstimmen. Genügt  $f^{(l)}(x, q)$  ausserdem der Wahrscheinlichkeitsbedingung  $f^{(l)}(x, q) \geq 0$  dann bezeichnen wir  $f^{(l)}(x, q)$  als eine in  $l$ -ter Ordnung regularisierte Wahrscheinlichkeitsdichte zur Verteilungsdichte  $f(x, q)$ . Ohne weitere Bedingungen wird es zu einer Potenzreihe von  $f(x, q)$  im allgemeinen unendlich viele Regularisierungen  $l$ -ter Ordnung geben. Mit wachsendem  $l$  wird die Forderung  $f^{(l)}(x, q)$  solle nicht negativ sein, eine sehr starke Einschränkung bewirken, die es praktisch unmöglich macht, höhere Regularisierungen zu finden.

In § 2 wird die Regularisierung mit Hilfe der analytischen momentenerzeugenden Funktion untersucht. Symmetrieeigenschaften der Frequenzverteilung werden in § 3

verwendet, um die bekannte Clusterentwicklung bezüglich  $m_0 = m_1$  so zu interpolieren, dass sie in erster Ordnung, das heisst bis auf Terme der  $O(q^2)$  bzw. der  $O((1-q)^2)$  unverändert bleibt. In § 4 wird eine algebraische Regularisierung der symmetrisierten Clusterentwicklung in erster Ordnung durchgeführt, die in § 5 durch das Rayleigh-Theorem im wesentlichen eindeutig festgelegt wird. In § 6 wird die regularisierte Frequenzverteilung diskutiert und mit anderen Resultaten verglichen. § 7 enthält Bemerkungen über eine Ausdehnung der Regularisierung auf nicht algebraische Funktionen.

## § 2. Regularisierung mittels analytischer Funktionen

Ist  $f_0(x)$  eine Funktion einer spezielleren Funktionenklasse, z.B. eine stückweise analytische Funktion (im Reellen), so kann man durch die Forderung,  $f^{(l)}(x, q)$  solle derselben angehören, die Regularisierten weiter einschränken. Wegen der Parameter-abhängigkeit der Grenzen der einzelnen Stücke ist es auch dann noch mühsam, eine Regularisierung (im Reellen) zu finden. Diese Schwierigkeit kann man durch komplexe Integration umgehen.

Im Hinblick auf die komplexe Form der Clusterentwicklung werde die Regularisierung mittels einer komplexen Hilfsfunktion ausgeführt. Da  $x$  eine positive, beschränkte, stochastische Variable ist, werden die Momente aller absolut integrierbaren Verteilungen

$$\overline{x^n} = \int x^n f(x) dx \quad (2.1)$$

durch

$$|\overline{x^n}| \leq x_M^n \int |f(x)| dx \quad (2.2)$$

begrenzt sein, wobei  $x_M$  den oberen Rand des Spektrums darstellt. Hieraus folgt, dass die momentenerzeugende Funktion

$$r(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\overline{x^n}}{z^{n+1}} = \int \frac{f(x) dx}{z-x} \quad (2.3)$$

für  $|z| > x_M$  eine analytische Funktion ist, und daher für die Momente

$$\overline{x^n} = \frac{1}{2\pi i} \oint z^n r(z) dz \quad (2.4)$$

gilt, wobei der geschlossene Weg ausserhalb  $|z| = x_M$  herumzuführen ist. Schliesslich kann man den Weg noch so deformieren, dass er nur die Strecke  $0 \leq x \leq x_M$  umfasst. Damit lässt sich das Moment umformen in

$$\overline{x^n} = -\frac{1}{\pi} \int_0^{x_M} x^n \frac{r(x+i0) - r(x-i0)}{2i} dx, \quad (2.5)$$

wobei ein Vergleich mit 2.1 wegen  $r^*(z) = r(z^*)$

$$f(x) = -\frac{J}{\pi} r(x+i0) \quad (2.6)$$

ergibt. Die Verteilungsdichte  $f(x)$  einer beschränkten Variablen kann also immer als Imaginärteil des Randwertes einer analytischen Funktion  $r(x)$  geschrieben werden. Einfache Pole in  $r(x)$  ergeben dabei  $\delta$ -förmige Singularitäten in  $f(x)$ , höhere Pole die entsprechenden Ableitungen der  $\delta$ -Funktion. In ähnlicher Weise berechnet sich der Mittelwert  $\varphi(x)$  einer ganzen analytischen Funktion in  $x$  (z. B. freie Energie, spezifische Wärme):

$$\overline{\varphi(x)} = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n \overline{x^n} = \frac{1}{2\pi i} \oint \varphi(z) r(z) dz. \quad (2.7)$$

Die Clusterentwicklung in ihrer ursprünglichen Form hat die Gestalt der Gleichung 2.7, wobei  $r(z)$  als Potenzreihe nach einem Störparameter  $q$  vorliegt. Man kann durch geeignete Regularisierung von  $r(z, q)$  in  $l$ -ter Ordnung eine Regularisierte  $f^{(l)}(x, q)$  von  $f(x, q)$  finden. Es ist nicht leicht, die Wahrscheinlichkeitsbedingung  $f^{(l)}(x, q) \geq 0$  in eine notwendige Bedingung für  $r^{(l)}(z, q)$  umzuwandeln.

Wir werden uns im folgenden nur für die algebraische Regularisierung in erster Ordnung interessieren und später einige Bemerkungen zu allgemeineren Regularisierungen machen. Die algebraische Regularisierte

$$r^{(1)}(z, q) = r_0(z) \left(1 + \frac{q}{\alpha} \frac{r_1(z)}{r_0(z)}\right)^\alpha \quad (2.8)$$

stimmt in 1. Ordnung mit  $r(z, q)$  überein und ist konvergent, da  $|q/\alpha \gamma_1(z)/\gamma_0(z)| < 1$  ist für genügend grosse  $|z|$  und  $\alpha \neq 0, \infty$ .

### § 3. Invarianzeigenschaften der Frequenzverteilung und Symmetrisierung der Clusterentwicklung

Wir diskutieren nun einige Eigenschaften der exakten Frequenzverteilung  $f(x, x_1, \varepsilon, q)$ , wobei  $x_1 = 1/m_1$ ,  $\varepsilon = 1 - m_2/m_1$  und  $q$  die Konzentration der  $m_2$ -Atome ist.

Aus der Bewegungsgleichung einer Kette

$$(2 - 4x m_l) u_l = u_{l+1} + u_{l-1} \quad (3.1)$$

und der zyklischen Randbedingung

$$u_{l+N} = u_l \quad (3.2)$$

folgt, dass das Spektrum der Eigenfrequenzen (für endliche  $N$  und im limes  $N \rightarrow \infty$ ) unverändert bleibt, falls man  $m_l$  durch  $m_l/\lambda$  ( $\lambda$  reell, positiv) und  $x$  durch  $\lambda x$  ersetzt. Es gilt also die Homogenitätsrelation

$$\lambda f(\lambda x, \lambda x_1, \varepsilon, q) \equiv f(x, x_1, \varepsilon, q). \quad (3.3)$$

Ferner wird durch Vertauschen der beiden Atome und ihrer Konzentrationen die physikalische Situation nicht geändert, folglich ist  $f(x)$  symmetrisch in bezug auf die Indizes 1 und 2, das heisst es besteht die Funktionalrelation

$$f\left(x, \frac{x_1}{1-\varepsilon}, -\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}, 1-q\right) \equiv f(x, x_1, \varepsilon, q). \quad (3.4)$$

Die Identitäten 3.3 und 3.4, die auch für die momentenerzeugende Funktion  $r(z)$  gelten, sollen im weiteren benutzt werden, um die Clusterentwicklung so zu interpolieren, dass die Resultate in 1. Ordnung sowohl in  $q$  als auch in  $1 - q$  exakt bleiben. Die Clusterentwicklung lautet in 1. Ordnung (siehe Ref. (8)):

$$r(z, q) = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_1)}} \left( 1 + \frac{q \varepsilon}{2} \frac{x_1}{z-x_1} - \frac{1}{1-\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_1}} + 0(q^2) \right). \quad (3.5)$$

Sie werde in nullter Ordnung auf eine geeignete mittlere Masse  $m_0$  ( $x_0 = 1/m_0$ ) mit  $m_0 - m_1 = 0(q)$  bezogen, so dass wegen

$$\frac{1}{\sqrt{z(z-x_1)}} = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_0)}} \left( 1 + \frac{x_1 - x_0}{2(z-x_0)} + 0(q^2) \right) \quad (3.6)$$

3.5 übergeht in

$$r(z, q) = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_0)}} \left( 1 + \frac{x_1 - x_0}{2(z-x_0)} + \frac{q \varepsilon}{2} \frac{x_0}{z-x_0} - \frac{1}{1-\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}} + 0(q^2) \right). \quad (3.7)$$

Wir wählen  $x_0$  so, dass im Term 1. Ordnung in  $q$  entweder A) die Glieder höchster Ordnung in  $z$  oder B) die Glieder höchster Ordnung in  $1/z$  wegfallen.

$$\text{A)} \quad x_0 = x_1 (1 + \varepsilon q + 0(q^2)), \quad \text{B)} \quad x_0 = x_1 \left( 1 + \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} q + 0(q^2) \right). \quad (3.8)$$

Die Glieder  $0(q^2)$  können so ergänzt werden, dass  $x_0$  symmetrievinvariant wird. Damit wird

$$\text{A)} \quad x_0 = \frac{x_1}{1-\varepsilon q}, \quad (3.9)$$

das heisst  $m_0$  entspricht der mittleren Masse  $\bar{m}$  bzw.

$$\text{B)} \quad x_0 = x_1 \left( 1 + \frac{\varepsilon q}{1-\varepsilon} \right), \quad (3.10)$$

das heisst  $1/m_0$  entspricht der mittleren reziproken Masse  $\overline{(1/m)}$ . Diese Wahl wäre auch ohne die obige Charakterisierung a priori naheliegend gewesen. Die zugehörigen Clusterentwicklungen werden somit

$$\text{A)} \quad r(z, q) = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_0)}} \left( 1 + \frac{q \varepsilon}{2} \frac{x_0}{z-x_0} - \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}} + 0(q^2) \right), \quad (3.11)$$

$$\text{B)} \quad r(z, q) = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_0)}} \left( 1 + \frac{q \varepsilon}{2} \frac{x_0}{z-x_0} - \frac{\varepsilon \left( \sqrt{\frac{z}{z-x_0}} - 1 \right)}{(1-\varepsilon) \left( 1 - \varepsilon \sqrt{\frac{z}{z-x_0}} \right)} + 0(q^2) \right). \quad (3.12)$$

Die Symmetrievinvarianz der Terme erster Ordnung in  $q$  ist nur dann gewährleistet, wenn man  $q$  und  $\varepsilon$  durch geeignete Interpolationsfunktionen  $\bar{q}(q)$  und  $\bar{\varepsilon}(\varepsilon, q)$  ersetzt.

Sie genügen der Symmetrievereinigung

$$\bar{q}(q) = \bar{q}(1-q), \quad (3.13)$$

$$\bar{\varepsilon}(\varepsilon, q) = \bar{\varepsilon} \left( -\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}, 1-q \right) \quad (3.14)$$

und müssen für kleine  $q$  in sich übergehen, d. h.

$$\bar{q}(q) = q + 0(q^2), \quad (3.15)$$

$$\bar{\varepsilon}(\varepsilon, q) = \varepsilon + 0(q). \quad (3.16)$$

Ferner sollen sie wegen ihrer späteren physikalischen Deutung höchstens den Variabilitätsbereich von  $q$  und  $\varepsilon$  besitzen:

$$0 \leq \bar{q} \leq 1, \quad (3.17)$$

$$-\infty \leq \bar{\varepsilon} \leq 1. \quad (3.18)$$

Die allgemeine Lösung der Funktionalgleichungen 3.13 und 3.14 kann man leicht angeben; es sind die geraden Funktionen in  $q - 1/2$  und  $1/\varepsilon - 1/2$ . Wir beschränken uns auf die polynomiale Lösung niedrigen Grades in  $q$ :

$$\bar{q} = q(1-q) = q - q^2, \quad (3.19)$$

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon(1-q) - \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}q = \varepsilon - q \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{1-\varepsilon}. \quad (3.20)$$

Sie befriedigen offenbar unsere Voraussetzungen (auch 3.18, da  $\bar{\varepsilon} = 1$  für  $0 < q < 1$  keine reellen Lösungen in  $\varepsilon$  hat). Eine interessante Eigenschaft der speziellen Interpolationsfunktion 3.20 ist, dass sie außer für  $\varepsilon = 0$  auch für ein ungeordnetes Gitter mit der Störkonzentration  $q = q_0 = (1-\varepsilon)/(2-\varepsilon)$  verschwindet, d. h. das Spektrum wäre identisch mit dem eines periodischen Kristalls. Diese Eigenschaft bleibt für beliebige stetige Interpolationsfunktionen  $\bar{\varepsilon}$  erhalten, da eine stetige Funktion, die für zwei Abszissen ein entgegengesetztes Vorzeichen hat, irgendwo dazwischen mindestens eine Nullstelle besitzt.

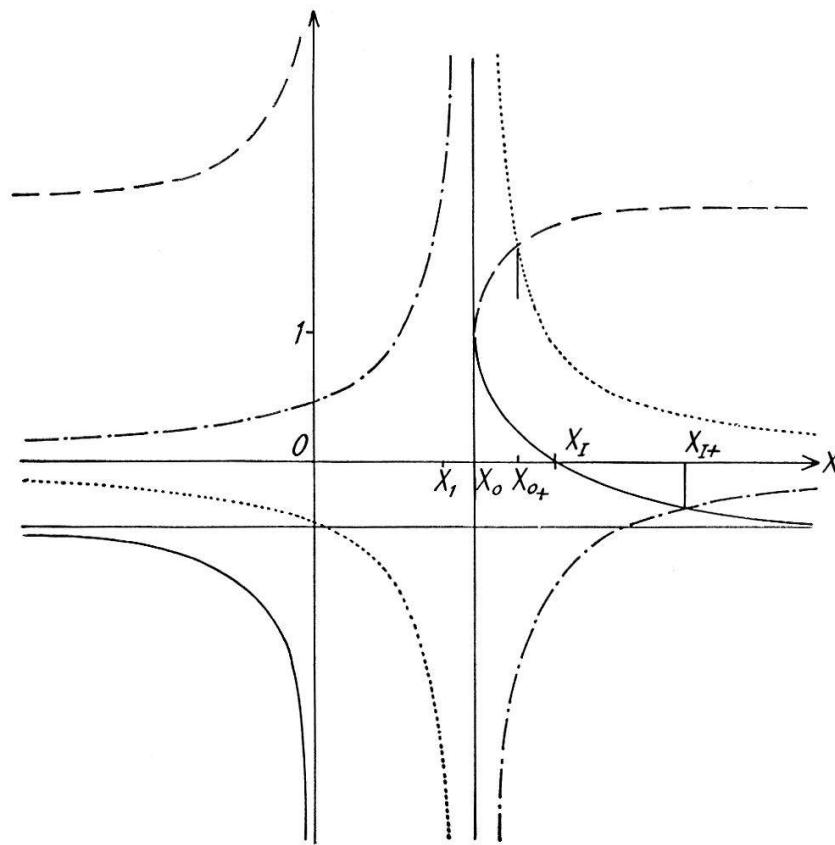
Wir werden nun die Regularisierung der Clusterentwicklungen 3.11 und 3.12 durchführen, wobei  $q$  und  $\varepsilon$  durch die speziellen Interpolationsfunktionen  $\bar{q}$  und  $\bar{\varepsilon}$  aus 3.19 und 3.20 zu ersetzen sind.

#### § 4. Algebraische Regularisierung in erster Ordnung

Zunächst werde der Fall A behandelt, bei dem  $m_0 = \bar{m}$  ist. Dieser Ansatz ist physikalisch vorzuziehen, da er das Verhalten für lange Wellen (Kontinuumstheorie) exakt beschreibt (siehe Ref. WEISS, MARADUDIN (12)). Die algebraische Regularisierung der interpolierten Clusterentwicklung in erster Ordnung ergibt somit

$$r^{(1)}(z, q) = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_0)}} \left[ 1 + \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2\alpha} \frac{x_0}{z-x_0} \frac{\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}}}{1-\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}}} \right]^\alpha, \quad (4.1)$$

wobei  $\alpha$  reell  $\neq 0$  oder  $\infty$  (siehe § 7) sei. Die Verteilungsdichte kann man durch analytische Fortsetzung auf dem oberen Ufer der reellen Axe finden. Die Nullstellen der Klammer diskutiert man am besten in der Form (siehe Fig. 1):



Figur 1

- rechte Seite von Gleichung 4.2 für  $\bar{\varepsilon} > 0$
- — — rechte Seite von Gleichung 4.2 für  $\bar{\varepsilon} < 0$
- ..... linke Seite von Gleichung 4.2 für  $\bar{\varepsilon}/\alpha > 0$
- · — linke Seite von Gleichung 4.2 für  $\bar{\varepsilon}/\alpha < 0$

$$\frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2 \alpha} \frac{x_0}{z - x_0} = 1 - \frac{1}{\bar{\varepsilon}} \sqrt{\frac{z - x_0}{z}}. \quad (4.2)$$

Ein Pol der Klammer ist die Nullstelle

$$x_I = \frac{x_0}{1 - \bar{\varepsilon}^2} \quad (4.3)$$

der rechten Seite von 4.2 für  $\bar{\varepsilon} > 0$ .

Lässt man  $\bar{q}, \bar{\varepsilon}$  den Wertebereich 3.17, 3.18 durchlaufen, so hat man folgende Nullstellen zu erwarten:

Fall  $\alpha > 0, \bar{\varepsilon} > 0$ .

Zwei Nullstellen für  $x < 0$ , falls  $\bar{q}/\alpha$  genügend gross. Zwei Nullstellen für  $x \in (x_0, x_I)$ , falls  $\bar{q}/\alpha$  genügend klein.

Fall  $\alpha > 0, \bar{\varepsilon} < 0$ .

Zwei Nullstellen für  $x < 0$ , falls  $\bar{q}/\alpha$  genügend gross.

Fall  $\alpha < 0, \bar{\varepsilon} > 0$ .

Eine Nullstelle  $x_{I+}$  für  $x > x_I$ , die für kleine  $-\bar{q}/\alpha$  gegen  $x_I$  strebt.

Fall  $\alpha < 0, \bar{\varepsilon} < 0$ .

Eine Nullstelle  $x_{0+}$  für  $x > x_0$ , die für kleine  $-\bar{q}/\alpha$  gegen  $x_0$  strebt.

Der Fall  $\alpha > 0$  lässt sich ohne quantitative Diskussion ausschliessen, da für  $\varepsilon > 0$  und  $\bar{q}/\alpha$  genügend klein die Verteilungsdichte für  $x \gtrsim x_0$  negativ wird. Der Fall  $\alpha < 0$  hingegen ergibt mit Hilfe von 2.6 eine Wahrscheinlichkeitsdichte:

Fall  $\alpha < 0, \bar{\varepsilon} \geq 0$ .

$$\text{Grundband } x \in (0, x_0): f^{(1)}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(x_0-x)}} \Re \left[ 1 - \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2\alpha} \frac{x_0}{x-x_0} \frac{i \bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x_0-x}}}{1+i \bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x_0-x}}} \right]^\alpha,$$

$$\text{Störband } x \in (x_I, x_{I+}): f^{(1)}(x) = \frac{-\sin \pi \alpha}{\pi \sqrt{x(x-x_0)}} \left[ -1 - \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2\alpha} \frac{x_0}{x-x_0} \frac{\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x-x_0}}}{1-\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x-x_0}}} \right]^\alpha,$$

$$x \text{ sonst: } f^{(1)}(x) = 0,$$

Fall  $\alpha < 0, \bar{\varepsilon} \leq 0$ .

$$\text{Grundband } x \in (0, x_0): f^{(1)}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(x_0-x)}} \Re \left[ 1 - \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2\alpha} \frac{x_0}{x-x_0} \frac{i \bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x_0-x}}}{1+i \bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x_0-x}}} \right]^\alpha,$$

$$\text{Randband } x \in (x_0, x_{0+}): f^{(1)}(x) = \frac{-\sin \pi \alpha}{\pi \sqrt{x(x-x_0)}} \left[ -1 - \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2\alpha} \frac{x_0}{x-x_0} \frac{\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x-x_0}}}{1-\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x-x_0}}} \right]^\alpha,$$

$$x \text{ sonst: } f^{(1)}(x) = 0.$$

Wir haben noch die Wahrscheinlichkeitsbedingung zu stellen. Für das Stör- bzw. Randband folgt  $-1 \leq \alpha < 0$ . Um das Vorzeichen von  $f^{(1)}(x)$  für das Grundband zu prüfen, bezeichnen wir den komplexen Ausdruck in der eckigen Klammer mit

$$u + i v = r e^{i\varphi}. \quad (4.5)$$

Wenn  $x$  von 0 nach  $x_0$  zunimmt, wächst  $r$  von 1 nach  $\infty$  während  $\varphi$  negativ ist und einerseits für  $\bar{\varepsilon} > 0$  von 0 nach 0 variiert und dazwischen ein Minimum mit  $\varphi_{Min} > -\pi/2$  annimmt, andererseits für  $\bar{\varepsilon} < 0$  von 0 nach  $-\pi$  variiert. Die Wahrscheinlichkeitsbedingung ist also für das Grundband erfüllt, wenn  $-1/2 \leq \alpha < 0$  ist. Die

Integrierbarkeit von  $f^{(1)}(x)$  verlangt für das Stör- bzw. Randband  $|\alpha| < 1$ , für das Grundband hingegen  $\alpha \leq 1/2$ . Sie schränkt also den Bereich für  $\alpha$

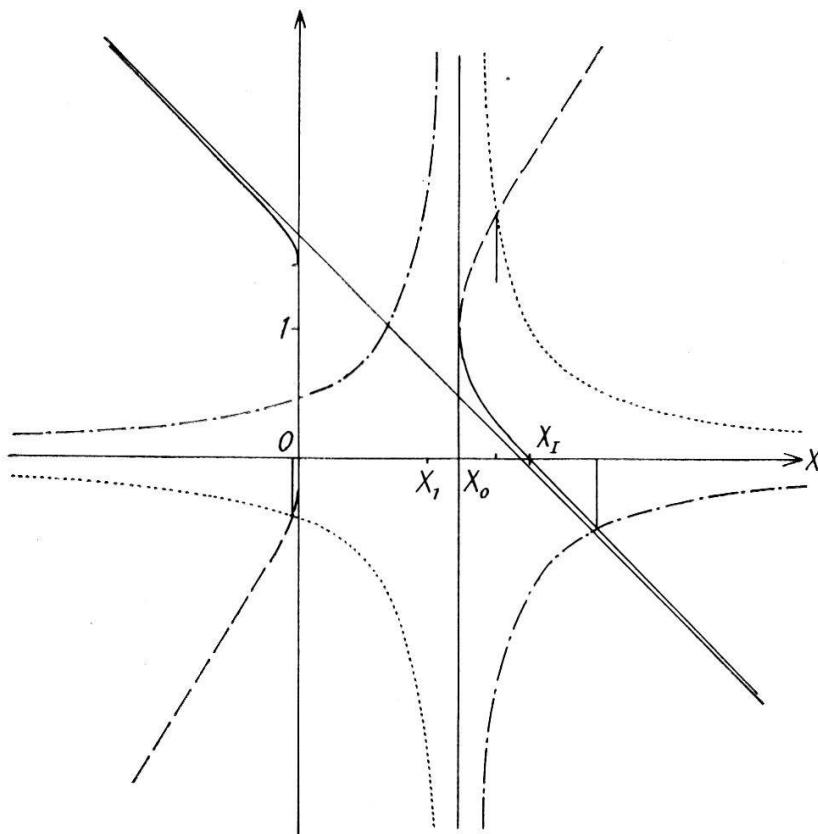
$$-\frac{1}{2} \leq \alpha < 0, \quad (4.6)$$

in dem die Wahrscheinlichkeitsbedingung erfüllt ist, nicht weiter ein.

Im Falle B, für den  $1/m_0 = (1/m)$  ist, liegen die Verhältnisse ganz ähnlich:

$$r^{(1)}(z, q) = \frac{1}{\sqrt{z(z-x_0)}} \left[ 1 + \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2} \frac{x_0}{z-x_0} \frac{\bar{\varepsilon}}{1-\bar{\varepsilon}} \frac{\sqrt{\frac{z}{z-x_0}} - 1}{1-\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}}} \right]^\alpha. \quad (4.7)$$

Die Nullstellen der Klammer folgen aus den Schnittpunkten der beiden Kurven (siehe Figur 2):



Figur 2

- rechte Seite von Gleichung 4.8 für  $\bar{\varepsilon} > 0$
- - - rechte Seite von Gleichung 4.8 für  $\bar{\varepsilon} < 0$
- ..... linke Seite von Gleichung 4.8 für  $\bar{\varepsilon}/\alpha > 0$
- · · — linke Seite von Gleichung 4.8 für  $\bar{\varepsilon}/\alpha < 0$

$$\frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2 \alpha (1-\bar{\varepsilon})} \frac{x_0}{z-x_0} = \frac{\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}} - 1}{\bar{\varepsilon} \left( \sqrt{\frac{z}{z-x_0}} - 1 \right)}. \quad (4.8)$$

Sie haben die folgende Lage, wenn  $\bar{q}, \bar{\varepsilon}$  im Bereich 3.17, 3.18 variieren.

Fall  $\alpha > 0, \bar{\varepsilon} > 0$ .

Zwei Nullstellen für  $x \in (x_0, x_1)$ , falls  $\bar{q}/\alpha$  genügend klein.

Fall  $\alpha > 0, \bar{\varepsilon} < 0$ .

Keine Nullstellen.

Fall  $\alpha < 0, \bar{\varepsilon} > 0$ .

Eine Nullstelle für  $x < 0$ , falls  $-\bar{q}/\alpha$  genügend gross. Eine Nullstelle für  $x > x_1$ , die für kleine  $-\bar{q}/\alpha$  gegen  $x_1$  strebt.

Fall  $\alpha < 0, \bar{\varepsilon} < 0$ .

Eine Nullstelle für  $x < 0$ , falls  $-\bar{q}/\alpha$  genügend gross. Eine Nullstelle für  $x > x_0$ , die für kleine  $-\bar{q}/\alpha$  gegen  $x_0$  strebt.

Der Fall  $\alpha > 0$  befriedigt ebenfalls nicht die Wahrscheinlichkeitsbedingung, da  $f^{(1)}(x)$  für  $x \gtrsim x_0$  negativ wird. Für den Bereich  $-1/2 \leq \alpha < 0$  hingegen ist  $f^{(1)}(x)$  eine Wahrscheinlichkeitsdichte, die für  $\bar{\varepsilon} > 0$  aus Grundband und Störband, für  $\bar{\varepsilon} < 0$  aus Grundband und Randband besteht. Ferner können, je nach Wahl der Interpolationsfunktionen  $\bar{q}, \bar{\varepsilon}$ , am unteren Rand des Grundbandes anschliessende (positive!) Spektralanteile auftreten, die formal die Wahrscheinlichkeit einer imaginären Frequenz angäben und daher unphysikalisch sind. Inwieweit diese Anteile für unsere spezielle Interpolation vorhanden sind, soll nun im Zusammenhang mit dem Rayleigh-Theorem untersucht werden.

### § 5. Anwendung des Rayleigh-Theorems

Das Rayleigh-Theorem, ein Spezialfall des Saxon-Hutner-Luttinger-Theorems (siehe Ref. SAXON, HUTNER (13), LUTTINGER (14), RAYLEIGH (15)), macht Aussagen über den kleinsten Träger des Frequenzspektrums eines Systems von harmonisch gekoppelten Massenpunkten. Die maximale Eigenfrequenz ist kleiner oder höchstens gleich der Maximalfrequenz eines Systems, bei dem alle Massenpunkte mit der kleinsten, ursprünglich vorkommenden Masse belegt sind. Für unser Gitter ergeben sich also die Schranken

$$0 \leq x \leq \text{Max} \left( \frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2} \right) = \begin{cases} \frac{x_1}{1-\bar{\varepsilon}} & \bar{\varepsilon} > 0 \\ x_1 & \bar{\varepsilon} \leq 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Wir fordern nun, dass unsere Lösungen im ganzen Wertebereich mit der speziellen Interpolation 3.19, 3.20 diesen Schranken genügen. Der Fall B scheidet daher sofort aus, da für  $\bar{\varepsilon} < 0$  und  $-1/2 \leq \alpha < 0$

$$-\frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2 \alpha (1-\bar{\varepsilon})} \leq \frac{1}{\bar{\varepsilon}} \quad (5.2)$$

gemacht werden kann (siehe Appendix A) und also die Nullstelle  $x < 0$  tatsächlich existiert. Im Falle A mit  $-1/2 \leq \alpha < 0$  treten keine negativen Nullstellen auf. Es bleibt noch zu zeigen, dass auch die obere Schranke von 5.1 eingehalten wird. Wegen der Symmetrie des Spektrums genügt es, den Beweis für  $\bar{\varepsilon} > 0$  zu führen. Für  $\bar{\varepsilon} > 0$  existiert ein Störband, dessen Ränder  $x_1$  bzw.  $x_{1+}$  sind. Der untere Rand liegt im Rayleighbereich, d.h.

$$x_1 = \frac{x_1}{(1-\bar{\varepsilon}^2)(1-\bar{\varepsilon} q)} \leq \frac{x_1}{1-\bar{\varepsilon}} \quad (5.3)$$

falls die Interpolationsfunktion  $\bar{\varepsilon}$  die Ungleichung

$$\bar{\varepsilon} \leq \sqrt{\frac{\varepsilon(1-q)}{1-\varepsilon q}} \quad (5.4)$$

befriedigt. Die spezielle Interpolation 3.20 erfüllt diese Bedingung (siehe Appendix B). Analog fordert das Rayleigh-Theorem für den oberen Rand

$$x_{1+} \leq \frac{x_1}{1-\varepsilon}, \quad (5.5)$$

oder

$$-\frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}^2}{2\alpha} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon(1-q)} \leq \sqrt{\frac{\varepsilon(1-q)}{1-\varepsilon q}} - \bar{\varepsilon}. \quad (5.6)$$

Diese Bedingung hat für *alle* Interpolationsfunktionen  $\bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{q}$ , insbesondere im Grenzfall  $q \rightarrow 1$  zu gelten. Wegen der Gleichungen 3.13 bis 3.16 wird daher

$$-\frac{1}{2\alpha} \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \leq \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}, \quad (5.7)$$

oder

$$\alpha \leq -\frac{1}{2}. \quad (5.8)$$

Zusammen mit 4.6 wird also

$$\alpha = -\frac{1}{2} \quad (5.9)$$

und daher die regularisierte Verteilung in ihrer algebraischen Form eindeutig aus der Wahrscheinlichkeitsbedingung und dem Rayleigh-Theorem festgelegt. Man kann zeigen (siehe Appendix C), dass  $\alpha = -\frac{1}{2}$  für die speziellen Interpolationsfunktionen  $\bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{q}$  auch hinreichend ist, um 5.6 im ganzen Variabilitätsbereich von  $\varepsilon$  und  $q$  zu erfüllen. Ebenso beweist man (siehe Appendix D), dass für  $\bar{\varepsilon} < 0$  und  $\alpha = -\frac{1}{2}$  der obere Rand  $x_{0+}$  des Randbandes den Schranken 5.1 gehorcht.

## § 6. Diskussion der Resultate

Wir haben somit eine Wahrscheinlichkeitsdichte gefunden, die dem Rayleigh-Theorem gehorcht:

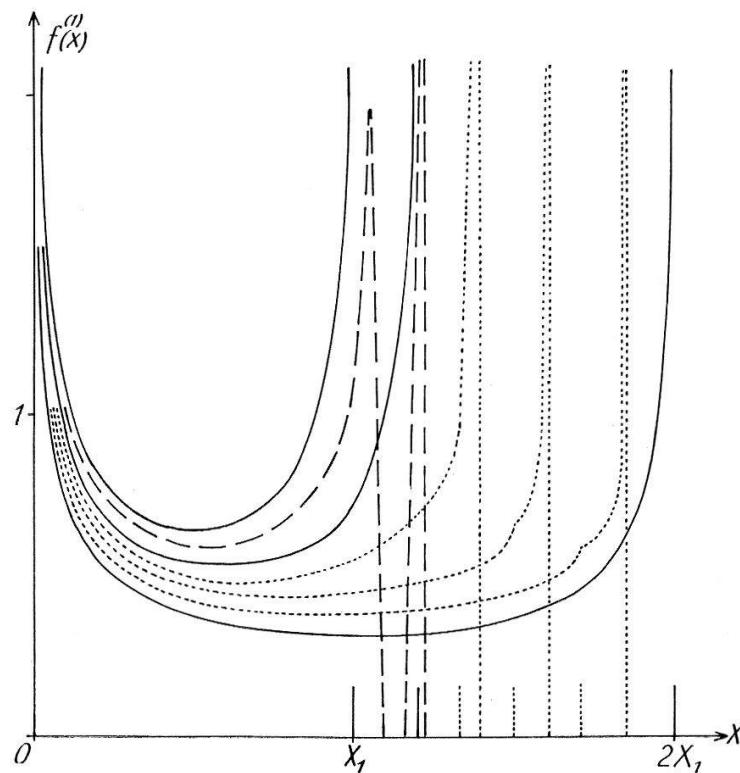
$$\left. \begin{aligned} x \in (0, x_0): f^{(1)}(x) &= \frac{\Re}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x(x_0-x)-\bar{q} \bar{\varepsilon} x_0 x} \frac{i \bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x_0-x}}}{1+i \bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x_0-x}}}}, \\ x \notin (0, x_0): f^{(1)}(x) &= \frac{\Re}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x(x_0-x)+\bar{q} \bar{\varepsilon} x_0 x} \frac{\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x-x_0}}}{1-\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{x}{x-x_0}}}}. \end{aligned} \right\} (6.1)$$

Die Gleichungen 3.19, 3.20 geben die spezielle Interpolation an. Unser Resultat besitzt wegen der geeigneten Ergänzung von 3.8 ferner für kleine  $x$  die exakte Form

$$f(x) = \sqrt{\frac{1-\varepsilon q}{x x_1}} (1 + O(x)) \quad (6.2)$$

der Elastizitätstheorie, bei der nur die Massendichte, d.h. die mittlere Masse pro Volumeinheit eingeht. Der Fall B, den wir bereits ausgeschlossen haben, hätte diese Eigenschaft nicht besessen.

In Figur 3 sind die Wahrscheinlichkeitsdichten 6.1 für ein Massenverhältnis  $m_1/m_2 = 2$  und einige Konzentrationen aufgetragen. Für  $\varepsilon > 0$  besteht das Spektrum aus Grund- und Störband; das letztere ist für kleine  $q$  sehr schmal (Störlinie für  $q \rightarrow 0$ ), und verbreitert sich zunächst mit wachsendem  $q$ . Für  $q \gtrsim q_0 = 1/3$  verschmäler sich das Störband erneut und nähert sich dem oberen Rand des Grundbandes, so dass eine kleine Lücke bestehen bleibt, die für  $q = q_0$  verschwindet. Das Spektrum ist dann identisch mit dem eines periodischen Kristalls mit der Atommasse  $m_1(1 - \varepsilon q_0)$ . Für  $q \gtrsim q_0$  verbreitert sich das aus Grundband  $(0, x_0)$  und Randband  $(x_0, x_{0+})$  bestehende Spektrum weiter, wobei in  $x_0$  eine Unstetigkeit der Ableitung ist, die erst für  $q = 1$ , dem Fall des reinen  $m_2$ -Kristalls verschwindet. Dieser Verlauf des Spektrums bleibt qualitativ auch für komplizierte Interpolationen bestehen. Entwickelt man in 6.1 den Radikanden nach  $q$  und berücksichtigt nur Glieder 1. Ordnung, so findet man wegen 3.15 und 3.16 ein von der Interpolation unabhängiges Resultat, das mit der von Langer (siehe Ref. (5)) durch selektive Summation ermittelten Lösung identisch ist. Diese hat aber den Nachteil, das Rayleigh-Theorem und die Kontinuumsapproximation nicht zu erfüllen und ferner am oberen Rand des Grundbandes singulär zu sein. Es wäre ohne weiteres möglich, die Langersche Lösung durch höhere Terme in  $q$  in unserem Sinne zu ergänzen. Charakteristisch für die Lösung ist jedoch ihre algebraische Form mit dem Exponenten  $\alpha = -1/2$ .



Figur 3

Frequenzspektren für  $\varepsilon = 1/2$  und  $q = 0$  (—),  $q = 1/6$  (---),  $q = 1/3$  (—),  $q = 1/2$  (.....),  $q = 2/3$  (.....),  $q = 5/6$  (.....),  $q = 1$  (—).

### § 7. Schlussbemerkungen

Die Frage, ob die Wahrscheinlichkeitsbedingung und das Rayleigh-Theorem alle nicht algebraischen Regularisierungen ausschliessen, bleibt noch offen. Betrachten wir im Falle A eine allgemeine Regularisierung, so wird das  $n$ -te Moment

$$\bar{x}^n = \frac{1}{2\pi i} \oint dz \frac{z^n}{\sqrt{z(z-x_0)}} [1 + \varrho + c_2 \varrho^2 + c_3 \varrho^3 + \dots], \quad (7.1)$$

wobei

$$\varrho = \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2} \frac{x_0}{z-x_0} \frac{\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}}}{1-\bar{\varepsilon} \sqrt{\frac{z}{z-x_0}}} \quad (7.2)$$

ist. Wenn  $r^{(1)}(z)$  ein Polynom in  $\varrho$  ist, so werden die mehrfachen Pole in  $x = x_1$  für  $f^{(1)}(x)$  Anlass zu endlich hohen Ableitungen der  $\delta$ -Funktion geben, deren Träger der Punkt  $x_1$  bleibt. Die Wahrscheinlichkeitsbedingung für  $x \sim x_1$  verlangt nun, dass entweder alle  $c_l = 0$  sind oder eine unendliche Teilfolge  $c_l \neq 0$  existiert. Der erste Fall entspricht der interpolierten Clusterentwicklung und scheidet aus, da für  $x \approx x_0$   $f(x) < 0$  wird. Die Wahrscheinlichkeitsbedingung erfordert also eine unendliche Reihe in  $\varrho$ , die (im allgemeinen) zu einem endlichen Träger im Störbereich führt, d. h. die ursprüngliche  $\delta$ -förmige Singularität (Störlinie) der Clusterentwicklung wird zu einem regulären Störband (daher die Bezeichnung Regularisierung). Insbesondere fordert sie ein System von Ungleichungen für die Momente, deren einfachste die positive Varianz  $\bar{x}^2 > \bar{x}^2$  verlangt, das heißt es muss

$$\frac{1}{2} + \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}^3}{(1-\bar{\varepsilon})^2} - (1-c_2) \frac{\bar{q}^2 \bar{\varepsilon}^4}{(1-\bar{\varepsilon})^2} > 0 \quad (7.3)$$

gelten. 7.3 ist für den Wertebereich  $\bar{\varepsilon}, \bar{q}$  erfüllt, falls  $3/2 \leq c_2 < \infty$  ist. Entsprechend ergeben sich für die höheren Koeffizienten kompliziertere Ungleichungen, die die zulässigen Regularisierungen einschränken; zum Beispiel wäre die Funktion  $e^\varrho$  (formal  $\alpha = 1/(1-2c_2) = \infty$ ) ausgeschlossen. Das allgemeine Problem der Eindeutigkeit der Regularisierung mit Wahrscheinlichkeitsbedingung und Rayleigh-Theorem bleibt ungeklärt, vermutlich existieren für endliche Ordnungen mehrere Lösungen (siehe Konfigurationsmittelung).

Zum Schluss seien noch die Momente von 7.1 explizite berechnet:

$$\bar{x}^n = \sum_{l=0}^n \bar{x}_l^n, \quad (7.4)$$

$$\bar{x}_l^n = c_l x_0^n \left( \frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}^2}{2} \right)^l \sum_{h=0}^l \binom{l}{h} \bar{\varepsilon}^{l-h} \sum_{m=0}^{n-l} (-)^m \binom{\frac{h-1}{2} - l}{m} \frac{1}{(1-\bar{\varepsilon}^2)^{n-m}}. \quad (7.5)$$

Man verifiziert leicht, dass sie wegen der  $q$  abhängigen Interpolationsfunktion  $\bar{\varepsilon}$  rationale Funktionen in  $q$  sind und im limes  $\varepsilon \rightarrow -\infty$  existieren, wobei die zugehörige Verteilung

$$f^{(1)}(x, x_1, -\infty, q) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(x_1(1-q)^2 - x)}} \quad (7.6)$$

keine  $\delta$ -förmige Singularität für  $x = 0$  aufweist. Sie stimmen in erster Ordnung wegen der Regularisierung  $c_0 = c_1 = 1$  mit den exakten Momenten überein. In diesem Sinne ist jede unserer interpolierten Lösungen der Verteilung des konfigurationsgemittelten Eigenfrequenzpolynoms unterlegen, da dessen Momente  $\bar{x}$ ,  $\bar{x}^2$ ,  $\bar{x}^3$  sogar exakt sind, und die höheren Momente Polynome in  $q$  (allerdings höheren Grades) bleiben.

In einer kommenden Arbeit wird gezeigt werden, dass die Konfigurationsmittelung, die eine symmetrische Regularisierung 1. Ordnung ist und dem Rayleigh-Theorem genügt (siehe Ref. 8), auch die Wahrscheinlichkeitsbedingung befriedigt.

Herrn Prof. A. THELLUNG möchte ich für einige kritische Bemerkungen danken.

Diese Arbeit wurde durch finanzielle Unterstützung seitens des SCHWEIZERISCHEN NATIONALFONDS ermöglicht.

### Appendix A

Vor.:

$$\bar{\varepsilon} < 0, \quad -\frac{1}{2} \leq \alpha < 0. \quad (\text{A.1})$$

Beh.:

$$-\frac{\bar{q} \bar{\varepsilon}}{2 \alpha (1 - \bar{\varepsilon})} \leq \frac{1}{\bar{\varepsilon}}. \quad (\text{A.2})$$

Bew.:

$$\bar{\varepsilon} \leq -\frac{1 + \sqrt{1 + 4 \left( -\frac{\bar{q}}{2 \alpha} \right)}}{2 \left( -\frac{\bar{q}}{2 \alpha} \right)}. \quad (\text{A.3})$$

Diese Ungleichung, aus der A.2 folgt, gilt für  $\varepsilon \lesssim 1$  bzw.  $\gtrsim -\infty$  in einem endlichen  $q$  Bereich ( $0 \leq q \leq 1$ ), wie man graphisch leicht einsieht, da die Geradenschar  $\bar{\varepsilon}$  in einem  $\bar{\varepsilon}(q)$  Diagramm den ganzen Halbstreifen  $\bar{\varepsilon} < 0$ ,  $0 < q < 1$  überstreicht.

### Appendix B

Vor.:

$$\varepsilon > 0, \quad \bar{\varepsilon} > 0. \quad (\text{B.1})$$

Beh.:

$$\bar{\varepsilon} \leq \sqrt{\frac{\varepsilon (1 - q)}{1 - \varepsilon q}}. \quad (\text{B.2})$$

Bew.:

$$\bar{\varepsilon} \leq \sqrt{\varepsilon (1 - q)}. \quad (\text{B.3})$$

Diese schärfere Ungleichung bedingt die Behauptung, da die rechte Seite in B.2 nach oben konvex ist. B.3 gilt, da  $\varepsilon \leq \sqrt{\varepsilon}$  (für  $q = 0$ ) und das Gleichheitszeichen nur für  $q \leq 0$  eintrifft.

### Appendix C

Vor.:

$$\varepsilon > 0, \quad \bar{\varepsilon} > 0. \quad (\text{C.1})$$

Beh.:

$$\bar{q} \bar{\varepsilon}^2 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon (1 - q)} \leq \sqrt{\frac{\varepsilon (1 - q)}{1 - \varepsilon q}} - \bar{\varepsilon}. \quad (\text{C.2})$$

Bew.: Es werden die Ungleichungen

$$\frac{\bar{q}}{1-q} \bar{\varepsilon}^2 \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right)^2 \leq q \leq \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\varepsilon(1-q)}{1-\varepsilon q}} - \bar{\varepsilon} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \quad (\text{C.3})$$

bewiesen, aus denen die Behauptung C.2 folgt. Die linke Ungleichung

$$\bar{\varepsilon}^2 \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right)^2 \leq 1 \quad (\text{C.4})$$

gilt, da sie für  $q = 0$  gilt, und das Gleichheitszeichen nur für  $q = 1$  angenommen wird. Die rechte Ungleichung in C.3

$$q \leq \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\varepsilon(1-q)}{1-\varepsilon q}} - \bar{\varepsilon} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \quad (\text{C.5})$$

wird zu

$$0 \leq \frac{(1-\varepsilon)^2 (1-q)}{1-\varepsilon q} \left[ \frac{1}{\varepsilon} - (1-q)(1-\varepsilon q) \right] \quad (\text{C.6})$$

und ist offenbar richtig. Also gilt auch die ursprüngliche Ungleichung C.2.

## Appendix D

Vor.:

$$\varepsilon > 0, \quad \bar{\varepsilon} < 0. \quad (\text{D.1})$$

Beh.:

$$\bar{q} \bar{\varepsilon}^2 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon(1-q)} \leq \sqrt{\frac{\varepsilon(1-q)}{1-\varepsilon q}} - \bar{\varepsilon}. \quad (\text{D.2})$$

Bew.: D.2 ist richtig, da sogar die schärfere Ungleichung

$$\bar{q} \bar{\varepsilon}^2 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon(1-q)} \leq -\bar{\varepsilon} \quad (\text{D.3})$$

gilt. D.3 geht über in

$$-q \bar{\varepsilon} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} = -q(1-\varepsilon - q(2-\varepsilon)) \leq 1. \quad (\text{D.4})$$

D.4 ist richtig, da beide Faktoren dem Betrage nach kleiner als 1 sind.

## Literatur

- <sup>1)</sup> F. J. DYSON, Phys. Rev. 92, 1331 (1952).
- <sup>2)</sup> C. DOMB, A. A. MARADUDIN, E. W. MONTROLL, G. H. WEISS, Phys. Rev. 115, 24 (1959).
- <sup>3)</sup> R. J. RUBIN, R. ZWANZIG, J. Math. Phys. 2, 861 (1961).
- <sup>4)</sup> V. L. BONCH-BRUEVICH, S. V. TYABLIKOV, The Green Function Method in Statistical Mechanics (Amsterdam 1962).
- <sup>5)</sup> J. S. LANGER, J. Math. Phys. 2, 584 (1961).
- <sup>6)</sup> S. TAKENO, Progr. Theor. Phys. 25, 102 (1961); 28, 33 (1962); 28, 631 (1962).
- <sup>7)</sup> J. MAHANTY, Nuovo Cimento 19, 46 (1961).
- <sup>8)</sup> W. SCHLUP, Helv. Phys. Acta 36, 41 (1963); 36, 570 (1963).
- <sup>9)</sup> E. W. MONTROLL, R. B. POTTS, Phys. Rev. 102, 72 (1956).
- <sup>10)</sup> I. M. LIFSHITZ, G. I. STEPANOVA, Soviet Phys. JETP 3, 656 (1956).
- <sup>11)</sup> C. DOMB, A. A. MARADUDIN, E. W. MONTROLL, G. H. WEISS, Phys. Rev. 115, 18 (1959).
- <sup>12)</sup> G. H. WEISS, A. A. MARADUDIN, J. Phys. Chem. Solids 7, 327 (1958).
- <sup>13)</sup> D. S. SAXON, R. A. HUTNER, Philips Res. Rep. 4, 81 (1949).
- <sup>14)</sup> J. M. LUTTINGER, Philips Res. Rep. 6, 303 (1951).
- <sup>15)</sup> LORD RAYLEIGH, Theory of Sound, Chapter IV (New York 1945).