

不規則系の統計物理学 (V)

京大基研 松田博嗣

(続き)

以上は空間のある点で初期条件を与えた波動関数はその点から十分離れた点で不規則性のため指数関数的に振巾が距離と共に増大すると考えられることを述べた。これと波動関数の局在性とのつながりを見るために、我々はより深い検討を「randomness と波動関数の関係」に対して行なうことにしよう。

取扱う model は (12.1) で与えられるものとする。

$$-b_n u_n + u_{n+1} + u_{n-1} = 0 \quad (12.1)$$

(そして $b_n b_{n+1} \neq 0$ なる n があるとする。)

この場合に (12.1) が $\lim_{N \rightarrow \infty} u_{\pm N} = 0$ という non-trivial solution をもつ必要十分条件を求めてみよう。

今、 $u_0 \neq 0, u_{-1} \neq 0$ としよう。

$n > 0$ では

$$\begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = T(n, 0) \begin{pmatrix} u_0 \\ u_{-1} \end{pmatrix}, \quad \left(T(n, 0) \text{ は transfer matrix である。} \right)$$

そして

$$\begin{aligned} T(n, 0) &= \begin{pmatrix} b_{n-1} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{n-2} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} b_0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (12.9) \\ &\equiv \begin{pmatrix} A_n & B_n \\ A_{n-1} & B_{n-1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である。

松田博嗣

$A_0 = 1, A_1 = b_0, B_0 = 0, B_1 = -1; A_{n+1} = b_n A_n - A_{n-1},$
 $B_{n+1} = b_n B_n - B_{n-1}$ が成立し, $n \geq 2$ では

$$\frac{A_n}{B_n} = -b_0 + \frac{1}{b_1 + \frac{1}{b_2 + \frac{1}{\ddots + \frac{1}{b_{n-1}}}}}$$

一方 $u_N = A_N u_0 + B_N u_{-1}$ であり,

$$\lim_{N \rightarrow \pm\infty} u_{\pm N} = 0 \quad (12.10)$$

より, $\lim_{N \rightarrow \infty} B_N = 0$ とはならない。

何故なら, もし $\lim_{N \rightarrow \infty} B_N = 0$ なら (12.9) より

$$A_n B_{n-1} - A_{n-1} B_n = 1 \quad (12.11)$$

をみたすために, $\lim_{\nu \rightarrow \infty} |A_{n(\nu)}| = +\infty$ となるような $\{n\}$ の部分列 $\{n(\nu)\}$

($\nu = 1, 2, \dots$) が存在することになり (12.10) に矛盾するからである。

従って, 適当な数 $c (> 0)$ に対して $|B_{m(\nu)}| > c > 0$ なる無限部分列 $\{m(\nu)\}$ が存在し, これを用いて u を

$$u_{m(\nu)} = B_{m(\nu)} \left(\frac{A_{m(\nu)}}{B_{m(\nu)}} u_0 + u_{-1} \right) \text{ のように表わす。 } \lim_{\nu \rightarrow \infty} u_{m(\nu)} = 0 \text{ より,}$$

上式の () は zero に tend する。

u_0, u_{-1} が与えられているのだから $\frac{A}{B} = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{A_{m(\nu)}}{B_{m(\nu)}}$ が存在し, 必要条件としては $u_{-1} = -\frac{A}{B} u_0$ が成立することになる。これより,

$$u_N = B_N \left(\frac{A_N}{B_N} - \frac{A}{B} \right) u_0 \text{ を得る。}$$

一方, determinant formula (12.11) より

$$\frac{A_n}{B_n} - \frac{A_{n-1}}{B_{n-1}} = \frac{1}{B_n B_{n-1}}$$

$$u_N = -B_N \lim_{\nu \rightarrow \infty} \sum_{n=N}^{m(\nu)-1} \left(\frac{1}{B_n B_{n+1}} \right) u_0$$

つまり

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\nu \rightarrow \infty} B_N \sum_{n=N}^{m(\nu)-1} \frac{1}{B_n B_{n+1}} = 0 \quad (12.11)$$

となる。

これを逆に考えて、 $n < 0$ に対して、

$$\begin{pmatrix} u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{n-1} & \tilde{B}_{n-1} \\ \tilde{A}_n & \tilde{B}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{-1} \\ u_0 \end{pmatrix}$$

この場合は

$$\lim_{N \rightarrow -\infty} \lim_{\nu \rightarrow -\infty} \tilde{B}_N \sum_{n=N}^{m(\nu)-1} \frac{1}{\tilde{B}_n \tilde{B}_{n+1}} = 0 \quad (12.12)$$

$$\frac{A}{B} = \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} \Rightarrow \underline{\text{必要条件}}$$

逆に $\lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{A_n(\nu)}{B_n(\nu)} = \frac{A}{B}$ が存在したとしよう。 $u_{-1} = -\frac{A}{B} u_0$ とおけば、

$$u_N = B_N \left(\frac{A_N}{B_N} - \frac{A}{B} \right) u_0, \text{ これより}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} u_N = 0$$

もし $u_0 = 0$ なら必要十分条件は $\lim_{N \rightarrow \infty} B_N = \lim_{N \rightarrow -\infty} \tilde{B}_N = 0$ である。

従って、求めるべき必要十分条件は

$$\lim_{N \rightarrow \infty} B_N = \lim_{N \rightarrow -\infty} \tilde{B}_N = 0$$

または $A/B, \tilde{B}/\tilde{A}$ が存在して $A/B = \tilde{B}/\tilde{A}$, さらに (12.11), (12.12)

松田博嗣

が成立することである。以下、実際の系で、この条件が満足されるか否かを検討しよう。まず B_n の性質を調べる。 $B_{n+1} = b_n B_n - B_{n-1}$ が成立しているから $z_n \equiv \frac{B_n}{B_{n-1}}$ で z_n を定義すれば、上の漸化式は $z_{n+1} = b_n - \frac{1}{z_n}$ となり z_1 が与えられると $z_1, z_2, \dots, z_n, \dots$ がきまり、 $\{b_n\}$ の分布が与えられると $\{z_n\}$ はマルコフ数列をなし、遷移確率 $p(z_n, z_{n+1})$ がきまることになる。

$$\text{そして } \ell_n \left| \frac{B_N}{B_0} \right| = \sum_{n=1}^N \ell_n |z_n|。$$

一方、大数の法則によると、もし、 x_1 の分布 $p(\cdot)$ が stationary absolute probability distribution で、ある空間の点集合 X に属する $\xi (\in X)$ の関数 f があるとする。そして $f(\xi) < c$ 。

ここで

$$E\{|f(x_1)|\} = \int_X |f(\xi)| p(d\xi) < c \text{ ならば}$$

$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n f(x_m)$ は確率 1 で存在する。ここで $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ はマルコフ過程の確率変数。もし、唯一の ergodic set があるならば

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n f(x_m) = \int_X f(\xi) p(d\xi) (= \alpha) \text{ が確率 1 で存在する。}$$

$$\text{これを } z_{n+1} = b_n - \frac{1}{z_n} \text{ に用いよう。} \quad (12.13)$$

つまり $z_n \longleftrightarrow x_n, \ell_n \longleftrightarrow f$ とする。従ってもし $n > N$ で $\langle \ell_n z_n \rangle \geq \alpha > 0$ ならば $|B_n| > c e^{\alpha n}$ for all $n (> N)$ 。

そして

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\nu \rightarrow \infty} B_N \sum_{n=N}^{\nu} \frac{1}{B_n B_{n+1}} = 0, \text{ これが確率 1 で成立する。}$$

Harmonic oscillator を例にとって考えてみる。 $\omega \simeq 0$ の近くで考えると

$$b_n = 2 - \frac{m_n \omega^2}{k} = 2 \cos \lambda_n \quad (12.14)$$

(m_n, λ_n が random variable である。)

ここで $\lambda_n = \bar{\lambda} + x_n, \langle x_n \rangle = 0$ で x_n を新たに、random variable

として導入する。ただし $0 < \bar{\lambda} \ll 1$ とする。

$$z_n \equiv \frac{\cos(\varphi_n + \bar{\lambda})}{\cos \varphi_n} \text{ により } \varphi_n \text{ を定義しよう。} \quad (12.15)$$

$$(0 \leq \varphi_n < \pi)$$

φ_n の分布密度を $\rho_n(\varphi_n)$ とすると

$$\begin{aligned} \alpha &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=2}^N \ell_n |z_n| \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=2}^N \int_0^\pi \{ \ell_n |\cos(\varphi + \bar{\lambda})| - \ell_n |\cos \varphi| \} \rho_n(\varphi) d\varphi \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \int_0^\pi \ell_n |\cos \varphi| \sum_{n=2}^N \{ \rho_n(\varphi - \bar{\lambda}) - \rho_n(\varphi) \} d\varphi \end{aligned}$$

今 $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(\varphi) = \rho(\varphi)$

が存在するとする (エルゴード仮定) と, $|\bar{\lambda}| \ll 1$ 故

$$\alpha = -\bar{\lambda} \int_0^\pi \ell_n |\cos \varphi| \left\{ \rho'(\varphi) - \frac{\lambda}{2} \rho''(\varphi) \right\} d\varphi + o(\bar{\lambda}^3) \quad (12.16)$$

(12.13) ~ (12.15) より

$$\varphi_{n+1} = g(\varphi_n, x_n), \quad \lambda_n = \bar{\lambda} x_n \quad (12.17)$$

とかける。実際

$$\sin \bar{\lambda} \{ \tan \varphi_{n+1} - \tan(\varphi_n + \bar{\lambda}) \} = 2(\cos \bar{\lambda} - \cos \lambda_n) \quad (12.18)$$

さて x_n の分布密度関数を $f(x_n)$ とすると, (12.16), (12.17) より

$$\begin{aligned} \rho(\varphi) &= \iint \rho(\varphi') f(x) \delta(\varphi - g(\varphi', x)) dx d\varphi' \\ &= \int \rho(g^{-1}(\varphi, x)) f(x) \frac{\partial \varphi'}{\partial \varphi} dx \end{aligned} \quad (12.19)$$

これより $\rho(\varphi)$ を求めるために

$$\varphi = g(\varphi', x) = \varphi' + \bar{\lambda} g_1(\varphi', x) + \bar{\lambda}^2 g_2(\varphi', x) + o(\bar{\lambda}^3)$$

$$\rho(\varphi) = \rho_0(\varphi) + \bar{\lambda} \rho_1(\varphi) + \bar{\lambda}^2 \rho_2(\varphi) + o(\bar{\lambda}^3)$$

松田博嗣

とにおいて (12.19) を逐次解くと

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\bar{\lambda}^2}{8} \langle (x^2 - 1)^2 \rangle + o(\bar{\lambda}^3) \\ &= \{ \langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle / 8K \langle m \rangle \} \omega^2 + o(\omega^2) \end{aligned} \quad (12.20)$$

となり, $A/B = \tilde{B}/\tilde{A}$ を除いては前述の必要十分条件をみたすことになる。質量が不規則に分布した一次元振動子系では変位 u_n は (12.1) の形の式をみたすが, 以上のことより $\lim_{n \rightarrow \pm\infty} |u_n| < \infty$ であるような解は, 少なくとも十分 ω が小さいときは確率 1 で $\lim_{n \rightarrow \pm\infty} u_n = 0$ となることが解り, 0 に収支する仕方は (12.20) によって与えられることが判った。このことは不規則系における波動関数局在化の Mott の予想を裏書きしている。

ただし以上の議論は無限系についてなされたもので, 果してこのことが十分大きい有限の系の固有関数に対して成立するかどうかは証明されていない。計算機実験の結果は上の結果を有限系に持込んでよさそうであることを示唆しているが, この問題は 2 次元以上での局在の問題と共にまだ理論的に未解決の部に属している。

§ 13. 近 似 法

1) Green 関数の展開近似法

[T. Matsubara & T. Kaneyoshi,
Prog. Theor. Phys. 36 ('66), 695]

ここでは例えば $G_e - A_s$ のような半導体の不純物伝導を議論しよう。これには Matsubara - Toyozawa model があり, 系の Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \sum_{\{m\}} \sum_{\{n\}} V_{mn} a_m^* a_n \quad (13.1)$$

ここで $\{ \}$ は impurity site sum である。又, V_{mn} は

$$\begin{aligned} V_{mn} &= V(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) \\ &\equiv \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)) V_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (13.2)$$

(\mathbf{R}_m は格子点の位置ベクトル)

ここで次の変換を a_m^* に施す。

$$A_{\mathbf{k}}^* \equiv \sum_{\{m\}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m) a_m^* \quad (13.3)$$

これにより

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^* A_{\mathbf{k}} \quad (13.4)$$

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{k}}, A_{\mathbf{k}'}^*]_+ &= \sum_{\{n\}\{m\}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_m) [a_n, a_m^*]_+ \\ &= \sum_n \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n] \\ &\equiv \rho(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (13.5a)$$

又,

$$[A_{\mathbf{k}}, A_{\mathbf{k}'}]_+ = [A_{\mathbf{k}}^*, A_{\mathbf{k}'}^*]_+ = 0 \quad (13.5b)$$

ここで次の Green 関数を入れる。

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z) \equiv \langle A_{\mathbf{k}} \frac{1}{z - \mathcal{H}} A_{\mathbf{k}'}^* \rangle \quad (13.6)$$

ここで次の Green 関数の効用を考えよう。

$$G_{mn}(E) = \langle a_m \frac{1}{E - \mathcal{H}} a_n^* \rangle$$

$$\mathcal{H} = \sum_{\mu} E_{\mu} B_{\mu}^* B_{\mu},$$

unitary 変換により

$$\begin{cases} a_m = \sum_{\mu} B_{\mu} b_{\mu m}, \\ \sum_n b_{\mu n}^* b_{\mu' n} = \delta_{\mu\mu'}, \quad \sum_{\mu} b_{\mu n}^* b_{\mu n'} = \delta_{nn'} \end{cases}$$

これを用いると,

$$G_{mn}(E) = \sum_{\mu} \frac{b_{\mu m} b_{\mu n}^*}{E - E_{\mu}}$$

松田博嗣

$$G_{mn}''(\mathbb{E}) \equiv \frac{i}{2} \lim_{r \rightarrow 0^+} \{G_{mn}(\mathbb{E}+ir) - G_{mn}(\mathbb{E}-ir)\} \text{ を定義する。}$$

$$(\mathbb{E} = \epsilon + i\Gamma)$$

$$= \frac{i}{2} \lim_{r \rightarrow 0^+} \sum_{\mu} b_{\mu m} b_{\mu n}^* \left\{ \frac{1}{\epsilon + i(\Gamma+r) - E_{\mu}} - \frac{1}{\epsilon - i(\Gamma+r) - E_{\mu}} \right\}$$

$$= \lim_{r \rightarrow 0^+} \sum_{\mu} b_{\mu m} b_{\mu n}^* \frac{\Gamma + r}{(\epsilon - E_{\mu})^2 + (\Gamma+r)^2}$$

• $\Gamma = 0$ のときは

$$G_{mn}''(\mathbb{E}) = \pi \sum_{\mu} b_{\mu m} b_{\mu n}^* \delta(\epsilon - E_{\mu})$$

• $\Gamma \neq 0$ のときは

$$G_{mn}''(\epsilon + i\Gamma) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{mn}''(\epsilon') \frac{\Gamma}{(\epsilon - \epsilon')^2 + \Gamma^2} d\epsilon'$$

つまり coarse-grained Green 関数とみれる。状態密度は

$$D(\mathbb{E}) = \sum_{\mu} \delta(\mathbb{E} - E_{\mu}) \text{ で与えられるから, 前式より}$$

$$D(\mathbb{E}) = \frac{1}{\pi} \sum_n G_{nn}''(\mathbb{E}) .$$

Matsubara - Toyozawa (M-T) model での電流は

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= e \dot{\mathbf{X}} \\ &= \frac{ie}{\hbar} \left[\mathcal{X}, \sum_{\{m\}} \mathbf{R}_m a_m^* a_m \right] \\ &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{\{m\}} \sum_{\{n\}} \mathbf{r}_{mn} a_m^* a_n \end{aligned}$$

ここに

$$\mathbf{r}_{mn} = (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) V_{mn}$$

従って Kubo formula を用いて, static conductivity tensor は

$$\begin{aligned} \sigma(s) &= \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda e^{-st} \langle J(-i\hbar\lambda) J(t) \rangle \\ &= 2 \left(\frac{\pi\hbar^2}{\hbar} \right) \int dE \mathcal{E}(E, s) \left(- \frac{\partial f}{\partial E} \right) \end{aligned}$$

$s\hbar\beta \ll 1$ ならば

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(E, s) &= - \sum_m \sum_n \sum_{m'} \sum_{n'} \mathbf{r}_{mn} G_{nm'}''(E + ish) \mathbf{r}_{m'n'} G_{n'm}''(E) \end{aligned}$$

そして

$$\sigma = \lim_{s \rightarrow 0+} \sigma(s); \quad \text{static conductivity}$$

以上のような効用がGreen関数にあることを注意し(13.6)の $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z)$ に対する考察を行なう。

(13.6)を $G_{\mathbf{h}\mathbf{h}'}(z)$ とし、これに(13.4)を代入し、 z^{-1} の巾で展開すると

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{h}\mathbf{h}'}(z) &\equiv \langle A_{\mathbf{h}} \frac{1}{z - \mathcal{H}} A_{\mathbf{h}'}^* \rangle \\ &= \frac{1}{z} \langle A_{\mathbf{h}} A_{\mathbf{h}'}^* \rangle + \frac{1}{z^2} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \langle A_{\mathbf{h}} A_{\mathbf{k}}^* A_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{h}'}^* \rangle + \dots \\ &= \frac{1}{z} \rho(\mathbf{h}' - \mathbf{h}) + \frac{1}{z^2} \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{h}' - \mathbf{k}) V_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k} - \mathbf{h}) \\ &\quad + \frac{1}{z^3} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \rho(\mathbf{h}' - \mathbf{k}_1) V_{\mathbf{k}_1} \rho(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) V_{\mathbf{k}_2} \rho(\mathbf{k}_2 - \mathbf{h}) + \dots \end{aligned} \tag{13.7}$$

ここで ρ はimpurity configurationによる。impurityは全くrandomとして、ensemble averageする。

$$\begin{aligned} \langle \rho(\mathbf{p}) \rangle_{AV} &= \langle \sum_{\{n\}} \exp(ip \cdot \mathbf{R}_n) \rangle_{AV} \\ &= \langle \sum_n \xi_n \exp(ip \cdot \mathbf{R}_n) \rangle_{AV} \quad * \end{aligned}$$

ここで

$$\xi_n = \begin{cases} 1 & n = \text{impurity} \\ 0 & n \neq \text{impurity} \end{cases}$$

松田博嗣

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \xi_n \rangle_{AV} = c \quad : c \text{ は concentration} \\ \langle \xi_n \xi_{n'} \rangle_{AV} = c^2 \quad \text{if } n \neq n' \end{array} \right. \quad \text{とすると}$$

$$\ast = c N \delta_{\mathbf{p}} \quad (13.8)$$

$$\delta_{\mathbf{p}} = \begin{cases} 1 & \mathbf{p} = \text{逆格子ベクトル} \\ 0 & \mathbf{p} \neq \text{ " } \end{cases}$$

又,

$$\begin{aligned} & \langle \rho(\mathbf{p}_1) \rho(\mathbf{p}_2) \rangle_{AV} \\ &= \langle \sum_{\{n\}} \exp(i(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{R}_n) \rangle_{AV} \\ & \quad + \langle \sum_{\{n \neq m\}} \sum \exp(i(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{R}_m)) \rangle_{AV} \\ &= N c \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2} + \sum_{m \neq n} \langle \xi_n \xi_m \exp i(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{R}_m) \rangle_{AV} \\ &= \text{ " } + \langle \sum_m \sum_n - \sum_n \rangle_{AV} \\ &= \text{ " } + c^2 \{ N^2 \delta_{\mathbf{p}_1} \delta_{\mathbf{p}_2} - N \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2} \} \end{aligned} \quad (13.9)$$

次に cummulant 展開を用いることにする。まず moment は

$$\left\{ \begin{array}{l} c(\underline{\xi}) = \langle e^{\xi_1 x_1 + \dots + \xi_M x_M} \rangle = \sum \frac{\xi_1^{m_1} \xi_2^{m_2} \dots \xi_M^{m_M}}{m_1! \dots m_M!} \mu(\underline{m}) \end{array} \right. \quad (13.10a)$$

$$\mu(\underline{m}) = \langle x_1^{m_1} \dots x_M^{m_M} \rangle \quad : \text{ moment}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \log c(\underline{\xi}) = \sum' \frac{\xi_1^{m_1} \dots \xi_M^{m_M}}{m_1! \dots m_M!} \langle x_1^{m_1} \dots x_M^{m_M} \rangle_c \end{array} \right. \quad (13.10b)$$

↓
cummulant

(cf. R.Kubo, J. Phys. Soc. Japan. 17 (1962), 1100)

cummulant と moment との間関係は、例えば

$$\begin{aligned} \langle \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3) \rangle &= \langle \rho(\mathbf{p}_1) \rangle_c \langle \rho(\mathbf{p}_2) \rangle_c \langle \rho(\mathbf{p}_3) \rangle_c \\ &+ \langle \rho(\rho(\mathbf{p}_1)) \rangle_c \langle \rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3) \rangle_c \\ &\quad + \langle \rho(\mathbf{p}_2) \rangle_c \langle \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_3) \rangle_c \\ &+ \langle \rho(\mathbf{p}_3) \rangle_c \langle \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2) \rangle_c + \langle \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3) \rangle_c \end{aligned}$$

一般には

$$\begin{aligned} \langle \rho(\mathbf{p}_1) \dots \rho(\mathbf{p}_s) \rangle_c &= \sum_{n_1} \dots \sum_{n_s} \langle \xi_{n_1} \dots \xi_{n_s} \rangle \exp \left[i \sum_{j=1}^s \mathbf{p}_j \mathbf{R}_{n_j} \right] \\ &= \sum_n \langle \xi^S \rangle_c N^\delta \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \dots + \mathbf{p}_s} \quad (13.11) \end{aligned}$$

$\langle \xi^S \rangle_c$ を求めるために、次の generating function を入れる。

$$\begin{aligned} g(x, c) &\equiv \sum_{s=1}^{\infty} \langle \xi^S \rangle_c x^S / S! \\ &= \langle \exp(\xi x) - 1 \rangle_c \\ &= \log \langle \exp(\xi x) \rangle_{AV} \\ &= \log (c e^x + 1 - c) \quad (13.12) \end{aligned}$$

$\langle \xi^S \rangle_c \equiv P_S(c)$ を定義すると、

$$\frac{\partial g(x, c)}{\partial x} = \sum_{s=0}^{\infty} P_{s+1}(c) x^s / s! = \frac{c e^x}{(1-c) + c e^x} \quad (13.13)$$

これにより $P_S(c)$ は求まる。

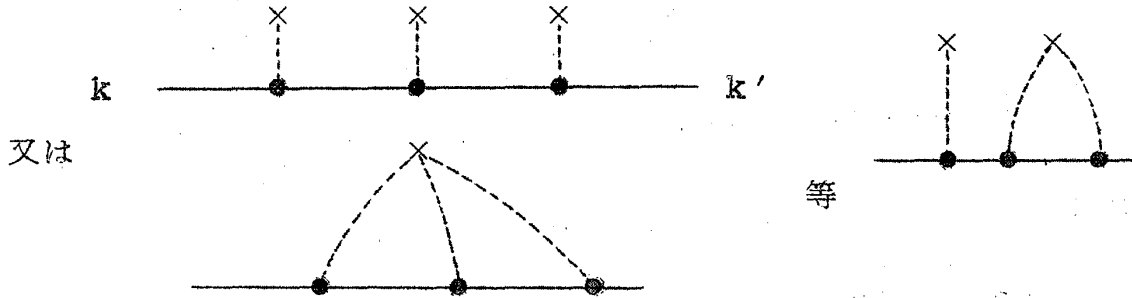
次に (13.7) の展開の各項を diagram で表わす事を考えよう。

1. electron line (—)

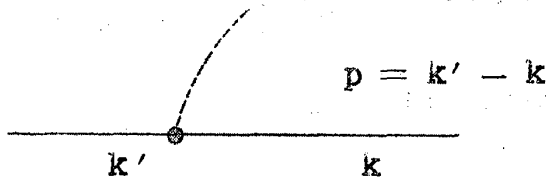
その上に n 個の vertex をつける。

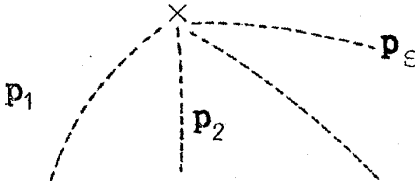


2. vertex から interaction line (.....) を引いて、あらゆる仕方
で結び × をつける。× の数は高々 n



3. 下の波数保存則をみたすように各 line に波数を割当てる。
(Green 関数の展開で出ている。)



4.  : 因子 $N p_s^{(c)} \delta_{p_1 + p_2 + \dots + p_s}$

5. 運動量 \hbar をもつ electron line には因子 V_{\hbar} をかけてあらゆる \hbar につ
いての和をとる。

6. n-th order diagram には z^{-n} をかける。
(vertex の数が n 個)

以上の規則により $\langle G_{kk'}(z) \rangle_{AV}$ が求まる。そして

$$\langle G_{kk'}(z) \rangle_{AV} \propto \delta_{kk'}$$

diagram を整理するために、これを proper と improper とに分ける。
(proper: 一本の electron line を切って独立な二つの diagram に分
けられないもの)

self-energy α は全ての proper diagram を集めたものである。

$$\alpha \equiv \text{diagram} = \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots + \text{diagram} + \dots$$

renormalized potential

$$V_k^* \equiv \text{diagram} = \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots$$

$$= \frac{V_k}{1 - \alpha V_k}$$

self energy は閉じた形には求められないが、そのうちある型の項は比較的簡単にその和が求められる。

1st order self-energy を $\alpha^{(1)}$ とすると

$$\alpha^{(1)} \equiv \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram}$$

$$= N [P_1(c) z^{-1} + P_2(c) z^{-2} V^* + P_3(c) z^{-3} V^{*2} + \dots]$$

$$V^* = \sum_k V_k^*$$

$\alpha^{(1)}$ は (13.13) を用いて閉じた形で求まることになる。

最終的には

$$\alpha^{(1)} = N z^{-1} \int_0^\infty dt e^{-t} \frac{c \exp(V^* z^{-1} t)}{1 - c + c \exp(V^* z^{-1} t)}$$

これより Green 関数がわかる。

何故なら、

$$\langle G_{kk'}(z) \rangle_{AV} = \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots$$

$$= \frac{\alpha \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{1 - \alpha V_{\mathbf{k}}}$$

従って α がわかれば $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ が求まることになる。

1 次のみで計算した結果ではスペクトルに微細構造は現れず，数値実験との一致はよくない。従って高次の self-energy を求める必要がある。一方，D. W. Taylor は不規則格子の振動スペクトルを求めるためにグリーン関数の近似計算を座標空間で行なったが，[Phys. Rev. 156 (1967), 1017]，この際の近似と，こうした diagram による近似との関連が調べられた。[Matsubara and Yonezawa, Prog. Theor. Phys, 37 (1967), 1346]。

Taylor の結果の計算機実験との比較をみると，(i) 3次元では1次元より近似がよい，(ii) スペクトルに対する近似がよくないときでも，coarse-grained スペクトルについては比較的よいようである。しかし何故そうなのか，どのような場合にどの程度近似がよいのかに対する明快なアプリオリの理論がないのが現状である。

2) Method of ensemble average of periodic systems

この近似法の基礎的な考え方は「場所 n から遠く離れた点の様子は $G''_{nn}(E)$ ($\text{Im } E > 0$) の値に余り影響を与えないだろう」とする点にあり，実際 $G''_{nn}(E)$ に影響を与え得るための有効距離が一次元で存在することが証明されているので [Matsuda, Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 36 (1966), 97]，こうした性質が次元に拘らず一般に成立するものと仮定して，それに基づいた近似を行なおうとするものである。

具体的な問題として

$$(\alpha_n - E_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k},n} + \beta_n^+ c_{\mathbf{k},n+1} + \beta_n^- c_{\mathbf{k},n-1} = 0$$

を充たす系を考えよう。この場合

$$G''_{nn'}(E) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{c_{\mathbf{k},n} c_{\mathbf{k},n'}^*}{E - E_{\mathbf{k}}}$$

に対して次のような性質をもつ有効距離 $\bar{\ell} = \bar{\ell}(E)$ が存在することが証明される。

$$(i) \quad |G_{nn'}(E)| < \sqrt{\bar{\ell}} \text{Min} \{ |G_{nn}(E)|, |G_{n'n'}(E)| \} e^{-|n-n'|/2\bar{\ell}}$$

$$\left. \begin{array}{l} |n-n'| \gg 1 \\ \text{Im } E > 0 \end{array} \right\}$$

(ii) ($|n-n'| < \ell$) では

$G_{nn'}(E)$ の値は $\{\alpha_j, \beta_j^\pm\}$ ($|j-n| > \ell, |j-n'| > \ell$) に依存するが、その値の $\{\alpha_j, \beta_j^\pm\}$ の変化による誤差は ℓ と共に $e^{-\ell/\bar{\ell}}$ に比例して減少する。

$$(iii) \quad \bar{\ell} \leq \ell_0 \equiv \text{Max}_n \{ 1 + (\bar{\beta}_n/\Gamma)^2 \}$$

$$\Gamma \equiv \text{Im } E > 0,$$

かくて coarse-grained state density は

$$\begin{aligned} D(E) &= \frac{1}{\pi} \sum_n G_{nn}''(E) \\ &\simeq \sum_{\sigma \ell} f_{\ell}(\sigma \ell) G''(\sigma \ell, E) \\ &\quad (\ell \gg \bar{\ell}(E)) \end{aligned}$$

ここで $\sigma \ell$ は ℓ 番目の近接位置までの環境を表わす parameter で $f_{\ell}(\sigma \ell)$ はその分布函数である。

従って coarse-grained state density を求めるためには $G''(\sigma \ell, E)$ ($\ell \gg \bar{\ell}(E)$) が判ればよい。一方周期系の state density は原理的に求め方が確立しているので、種々の周期系の集団を考え、そこにおける $f_{\ell}(\sigma \ell)$ が考察する非周期系のそれと一致するよう各周期系の state density に重率をかけて集団平均を取ることににより、非周期系の coarse-grained state density を求めることが出来る。

計算に用いる周期系の unit cell を大きくすればする程 $\text{Im } E$ を小さく取っても近似はよくなる。しかし計算時間は当然長くなる。一次元振動鎖の場合 unit cell が高々 8 コの原子を含むとしても微細構造をもつような coarse-grained スペクトルが得られ、この方法が有効であることが示された。

松田博嗣

[Matsuda and Ogita, Prog. Theor. Phys, 38 (1967), 81]

しかし一般次元の場合についての有効性, $\bar{\ell} = \bar{\ell}(E)$ の存在だけでなくその値を理論的に求めることなど, 種々問題点を残している。