

修士論文 (2002年度)

## 非保存的な決定論的非周期格子の一電子状態

東北大学大学院 理学研究科 遠藤理平<sup>1</sup>

## 目次

1	始めに	444
2	決定論的非周期格子とは	444
3	生成規則の分類	446
3.1	生成規則の一般論	446
3.2	可逆的な生成規則	449
3.3	非可逆な生成規則	451
3.4	自己相似格子の性質	453
4	自己相似格子の一電子状態	457
4.1	transfer matrix	458
4.2	近似格子の電子状態	458
4.3	trace map	460
4.4	trace map の軌道	463
4.5	自己相似格子の電子状態	464
4.6	可逆的自己相似格子の代表: Fibonacci 格子	467
4.7	非可逆的自己相似格子の代表: PD 格子	471
4.8	PD 格子の trace map の解析	476
4.9	特異な電子状態	477
4.10	Pisot 非可逆的自己相似格子の電子状態	479
5	まとめ	479
A	2次体の数論	482
B	multifractal 構造	484

<sup>1</sup>E-mail: rihei@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

## 1 始めに

生成規則によって作られる格子 (代表: Fibonacci 格子) の一電子状態を調べると, 波動関数は臨界状態 (critical state) と呼ばれる, 広がった状態 (extended state) と局在状態の中間的状态となり, エネルギースペクトルは Cantor 集合に似た multifractal 構造となる. そして, multifractal 構造を特徴付ける量である  $f(\alpha)$ -spectrum は普遍性 (universality) を持たず, 系を特徴付けるパラメタ (ポテンシャルの強さなど) に依存する. 以上のことは 1983 年の M.Kohmoto らの先駆的研究 [1] に引き続く研究によって明らかにされた. しかしながら上記の性質は, ある条件を満たした特別な生成規則によって作られた格子の一般的性質であり, すべての生成規則の場合に成り立つものではない. その特別な生成規則となる条件は, 生成規則が可逆的であることである. 本研究では, 生成規則が非可逆な格子のあるクラスの場合について,  $f(\alpha)$ -spectrum が普遍性を持つことを発見した. この研究成果によって, 1次元非周期格子上の一電子状態というもっとも単純な問題に関して, 基礎的な理解を一段と深めることができたと考えている. 本稿ではその概要を紹介する.

## 2 決定論的非周期格子とは

2種類のサイト  $A$  と  $B$  が, 1次元の格子上に並んでいるという簡単な系について考える.  $A$  と  $B$  の並び方にはいろいろあるが, すぐに思いつく並びには次のようなものがある:

$$\dots ABABABABABABABAB\dots, \quad \dots BABABBAABABBABA\dots$$

左は周期的で, 右はランダムである. 2種類のサイトにおけるポテンシャルの値をそれぞれ  $V_A$  と  $V_B$  としたときの一電子状態を調べることは, もっとも単純な問題である. サイトに番号 ( $j = -\infty, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, +\infty$ ) をつけて  $j$  番目のサイトにおける波動関数の振幅を  $\phi_j$  とすると, 次のような簡単な漸化式を満たす:

$$-t \phi_{j+1} - t \phi_{j-1} + V_j \phi_j = E \phi_j.$$

$t$  は transfer (hopping) integral,  $E$  はエネルギー固有値である. サイト  $j$  のポテンシャル  $V_j$  は  $V_A$  または  $V_B$  をとる. 上記の方程式は強結合近似における離散 Schrödinger 方程式として知られる.

上記のような周期的またはランダムな 1次元格子上の一電子状態の問題は過去からよく研究されている. しかし, サイトの並びには周期的でもないがランダムでもない, 第3の並びが存在する. それが決定論的かつ非周期的並びである. このような格子の一電子状態を調べるのが本研究での目的である. 本研究ではサイトの種類が2種の場合に議論を限定する.

1次元格子上の2種類のサイト  $A, B$  の並びを、以下のように分類し、波動関数とエネルギースペクトルの特徴を記す。

1. 周期格子 … ブロッホ波で記述される拡がった状態 (extended state) で、連続スペクトル。
2. ランダム格子 … 指数関数的に振幅が減少する局在状態 (アンダーソン局在)。
3. 決定論的非周期格子

広義の決定論的非周期格子とは、「何等かの規則によって作られる  $A, B$  の無限並び全般」といったところであるが、本研究では「生成規則 (inflation rule) によって作られる格子」に絞って話を進める。なお、ランダム格子の1格子点当たりのエントロピーはゼロでない有限値をとるが、何等かの規則によって作られる格子の1格子点当たりのエントロピーはゼロとなる。

一番簡単な生成規則は  $A \rightarrow B, B \rightarrow AB$  と表され、Fibonacci 格子と呼ばれる非周期格子を生成する。すなわち、この生成規則を繰り返すと次のような2種類のサイト  $A, B$  の並びが生成される。

$$B \rightarrow AB \rightarrow BAB \rightarrow ABBAB \rightarrow BABABBAB \rightarrow ABBABBABABBAB \rightarrow \dots \\ \rightarrow ABBABBABABBABBABABBABABBABABBAB \rightarrow \dots$$

この並びを、それぞれ Fibonacci 並びの第0世代、第1世代、 $\dots$ 、第  $n$  世代とする。Fibonacci 格子とはこのような系列の極限としての無限世代の並びを指す。このような生成規則によって作られる格子は、周期的でもなくランダムでもないが、 $A$  と  $B$  の並びは入れ子構造となっている。生成規則は任意に作ることができるので無限種類ある。生成規則によって作られる入れ子構造をもつ格子を、以下の議論では自己相似格子と呼ぶことにする。また、サイト  $A, B$  を文字  $A, B$  と呼ぶことがある。

1984年の準結晶の発見以降、自己相似格子に対する関心が高まった。しかしながら、その直前(1983年)に M.Kohmoto らの研究 [1] により、Fibonacci 格子の電子状態の主要な性質が明らかにされている。その結果は次のようにまとめられる [2],[3]。

- エネルギースペクトルは multifractal 構造 (図4) となり、それを特徴付ける  $f(\alpha)$ -spectrum はポテンシャルの差  $\Delta \equiv V_A - V_B$  に依存する。
- 波動関数は振幅がべき的に減衰する臨界状態 (critical state) となる (図5,6)。

以上のことについては、第4章で詳しく説明する。しかしながら上記の性質は、ある条件を満たす自己相似格子の特別なクラスの場合に成り立つ一般的性質であり、すべての自己相似格子の場合のそれではない。その特別な自己相似格子となるための条件は、その生成規則が可逆的であることである。本研究では、無限種類ある生成規則を可逆的なものと非可逆的なものの2種類に分類する(第3章)ことから始める。

後述するが、可逆的生成規則によって作られる格子を、**可逆的自己相似格子**と名づけ<sup>2</sup>。非可逆的生成規則によって作られる格子を**非可逆的自己相似格子**と名づける。自己相似格子には入れ子構造があるため、その電子状態の研究には **trace map** と呼ばれるくりこみ群的手法が使用できる [1]。可逆的自己相似格子の場合にはこの写像が**保存的**<sup>3</sup>となり、非可逆的自己相似格子の場合には**非保存的**となる。表題にある「非保存的」とはこのことである。この分類は今まであまり重要視されてこなかったが、電子状態に決定的な違いが出てくるのが本研究によって明らかになった。

後に述べるように、可逆的自己相似格子については詳細に研究されている。一方、非可逆的自己相似格子の性質については、個々の格子で広がった波動関数が存在することなどが知られていたが<sup>4</sup>、可逆的自己相似格子の研究のレベルには程遠い状態であった。本研究では、非可逆的自己相似格子の1つである **Period-Doubling 格子**<sup>5</sup>（以下、PD 格子と略称）の電子状態を調べている最中に、非可逆的自己相似格子の電子状態には普遍的性質があることを発見することができた。これには trace map の非保存性が本質的に関係している。

### 3 生成規則の分類

生成規則の分類の一般論については、参考文献 [6],[7],[8],[9]などを参照されたい。

#### 3.1 生成規則の一般論

##### 生成規則の等価性と随伴行列

異なった生成規則が同一の自己相似格子（位相のずれはあるが）を作り出す場合がある。そこで、それら同じ格子を作り出す生成規則をひとまとめにする。生成規則は一般的に  $A \rightarrow A' = u(A, B)$ ,  $B \rightarrow B' = v(A, B)$  と表すことができる。もし  $u(A, B)$  と  $v(A, B)$  の左端（右端）が同じものなら、両方とも右端（左端）にもってきた生成規則もまた同じ自己相似格子を作る（cyclic shift）。具体的には次の2つは等価である：

$$\begin{cases} A' = AB \\ B' = BABB \end{cases} \iff \begin{cases} A' = BA \\ B' = BBAB \end{cases} \quad (1)$$

このような2つの生成規則は区別しないこととする。これを**生成規則の等価性**という [6]。

生成規則  $A' = u(A, B)$ ,  $B' = v(A, B)$  は2種類の記号  $A, B$  の有限または無限の並びを異なる同様な並びに変換する変換操作と見なすことができる。その操作を  $\sigma$  と表せば、

<sup>2</sup>Fibonacci 格子は可逆的自己相似格子の最も簡単な例である。

<sup>3</sup>写像のヤコビアン絶対値が1となるもの。

<sup>4</sup>Period-Doubling 格子における周期的な固有状態の存在 [4] や、Copper-Mean 格子における広がった固有状態の存在 [5] など。

<sup>5</sup>生成規則は  $A \rightarrow BB, B \rightarrow AB$  で、Fibonacci 格子と比べて  $B$  が1つ多い。

$\sigma(A) = u(A, B), \sigma(B) = v(A, B)$ となる.  $\sigma$ は対 $(\sigma(A), \sigma(B))$ により指定できるので, この両者は同一視することができる:  $\sigma \equiv (\sigma(A), \sigma(B)) = (u(A, B), v(A, B))$ .

生成規則  $\sigma = (u(A, B), v(A, B))$  を,  $u(A, B)$  と  $v(A, B)$  のそれぞれに含まれる  $A$  と  $B$  の個数のみに注目して, 次のように表す:

$$(A' \ B') \sim (A \ B)M, \quad M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \quad (2)$$

ただし,  $u(A, B)$  ( $v(A, B)$ ) に含まれる  $A, B$  の数をそれぞれ  $a, c$  ( $b, d$ ) とした. 行列  $M$  は生成規則  $\sigma$  の随伴行列と呼ばれる [7]. 定義により, 随伴行列のすべての成分は整数でしかも負値をとらない. 例えば, Fibonacci 格子の場合には  $\sigma = (B, AB)$  なので,

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

となる. しかし随伴行列は  $u$  と  $v$  に含まれる  $A, B$  の個数のみを指定するだけで, その並び順までの情報は含まない. すなわち, 生成規則と随伴行列は等価なものではなく, 一般的には生成規則のほうで議論する必要がある. なお, 随伴行列の成分に対しては, 通常, 条件  $(a+d)bc \neq 0$  を課す. この条件は,  $M^2$  の行列成分がすべて正值となる条件—生成規則が primitive であること—と同じである.

### 分類 1: 対称性

自己相似格子を作る生成規則がある条件を満たす場合, 生成された格子はあるサイトを中心とする鏡映対称性を持つ. そのような条件としては明示的対称な場合と暗示的対称の場合の2つがある [9].

#### 対称の条件 (1)

生成規則  $\sigma = (u(A, B), v(A, B))$  の  $u(A, B)$  と  $v(A, B)$  が共に対称 (回文となっている). 例えば次のような例である:

$$(B, ABBA), \quad (BB, BABAB). \quad (4)$$

これを明示的対称と呼ぶ.

#### 対称の条件 (2)

$u(A, B), v(A, B)$  の右端もしくは左端に共通部分な文字  $A$  または  $B$  がある場合, その共通部分を除いた残りの部分がそれぞれ対称な場合である. つまり,  $R$  を  $A$  または  $B$  として,  $u(A, B) = Ru'(A, B), v(A, B) = Rv'(A, B)$  または,  $u(A, B) = u'(A, B)R, v(A, B) = v'(A, B)R$  としたときに  $u'(A, B), v'(A, B)$  が対称であればよい. 例えば,

$$(B, ABAB), \quad (BA, BBAB), \quad (BABB, ABABAB). \quad (5)$$

この場合を、**暗示的対称**という。以後、明示的な場合と、暗示的な場合をあわせて単に**対称**であると言うことにする。今回は 対称性を持つ自己相似格子に限って議論をする<sup>6</sup>。

## 分類 2：可逆性

生成規則  $A' = u(A, B)$ ,  $B' = v(A, B)$  を正則行列の間関係と見なしたときに、それが  $A$  と  $B$  について逆に解ける ( $A', B'$  のみならず  $A'^{-1}$ ,  $B'^{-1}$  の使用も許すとして) 場合に、それを**可逆的 (invertible)** 生成規則と呼ぶ [11]。例えば、Fibonacci 格子の場合には、

$$\begin{cases} A' = B \\ B' = AB \end{cases} \implies \begin{cases} A = B'(A')^{-1} \\ B = A' \end{cases} \quad (6)$$

と逆に解けるから、Fibonacci 格子の生成規則は可逆的である。これに対して、例えば生成規則が  $A' = BB$ ,  $B' = AB$  である PD 格子は**非可逆的 (non-invertible)** である。以下、生成規則が可逆的 (非可逆的) な自己相似格子を、可逆的自己相似格子 (非可逆的自己相似格子) と呼ぶ。一般に、生成規則が可逆的であるためには、随伴行列  $M$  が unimodular ( $\det M = \pm 1$ ) であることが必要である (ただし、十分ではない)。従って、可逆的自己相似格子は自己相似格子全体の中で圧倒的少数派である。なお、後述するように、可逆的自己相似格子は準周期格子 (= 1 次元準結晶) となる。

## 生成規則の合成

生成規則は合成することができる。2つの生成規則を  $\sigma_1 = (u_1(A, B), v_1(A, B))$ ,  $\sigma_2 = (u_2(A, B), v_2(A, B))$  とし、 $A$  と  $B$  の任意の並びに対して変換  $\sigma_1$  を行った後で変換  $\sigma_2$  を行うと、結果的に第3の変換  $\sigma_3$  を一回行ったのと同じになる。 $\sigma_3$  を  $\sigma_1$  と  $\sigma_2$  の合成と呼び、 $\sigma_3 = \sigma_2\sigma_1$  と表す [7]。  $\sigma_3 = (\sigma_3(A), \sigma_3(B)) = (\sigma_2(\sigma_1(A)), \sigma_2(\sigma_1(B)))$  により、次式が導かれる：

$$\sigma_3 = (u_1(u_2(A, B), v_2(A, B)), v_1(u_2(A, B), v_2(A, B))). \quad (7)$$

また、関連する随伴行列の間には、関係式  $M_3 = M_2M_1$  が成り立つ。もし、 $\sigma_1$  と  $\sigma_2$  が対称 (明示的または暗示的) であるならば、 $\sigma_3$  も対称となる。同様に  $\sigma_1$  と  $\sigma_2$  が可逆であれば、 $\sigma_3$  もまた可逆になる。

前段の  $M_3$  ように、他の2つの随伴行列の積に分解できるような随伴行列は**可約**と呼ぶことができる。また、積として現れる随伴行列は元の随伴行列の因子と呼ぶ。2つの行列  $1 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $J \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  は任意の随伴行列の因子となるので自明な因子と言える。随伴行列の可約性や既約性の議論ではこのような因子は除外する。可約な随伴行列の因子がまた可約であればそれはさらに分解できる。このような操作を続けてゆくと、可約な随伴行列

<sup>6</sup>自己相似格子の対称性と電子状態との関連については A. Hopf らの研究を参照されたい [10]。

は既約な随伴行列の積に「因数分解」することができる。ここで注意すべきは、整数の因数分解とは異なり、因子の順序を変えてはいけないことである。また、可約な随伴行列の「因数分解」が一意であるとは限らない。既約な随伴行列は、整数の因数分解の場合の素数に当たるが、後節で議論するように無限個存在する。特に、随伴行列  $M$  が unimodular ならば、その既約因子としては次の2種類のみが現れる<sup>7</sup>[9]：

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

従って、unimodular な随伴行列は例えば、次のように因数分解できる：

$$M = US \cdots UUS. \quad (\text{少なくとも1個の} U \text{を含む}) \quad (9)$$

正確に述べると、ここで述べたことは、条件  $a \leq b, c \leq d, a \leq c, b \leq d$  を課した場合にのみ正しい。この条件が満たされない場合には、生成規則において、 $A$  と  $B$  の役割を交換すれば、対応する随伴行列がその条件を満たす。

### 3.2 可逆的な生成規則

可逆的な生成規則の幾何学的意味は、M.Torikai らによって解明された [9]。ここでは、幾何学的なことには触れずに紹介する [8]。

#### 可逆的生成規則の性質 1

式 (9) の再形の随伴行列の中でもっとも簡単な例としては次の3個がある：

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = U, \quad M_{SM} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = US, \quad M'_{SM} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = SU. \quad (10)$$

前者は Fibonacci 格子の生成規則の随伴行列であるが、 $M_{SM}$  は Silver-Mean 格子と呼ばれる自己相似格子の生成規則の随伴行列である。 $M_{SM}$  を随伴行列とする生成規則は次の3種類存在する：

$$(B, ABB), \quad (B, BAB), \quad (B, BBA). \quad (11)$$

これらの生成規則はすべて等価である。この場合には問題ないのだが、 $M'_{SM}$  を随伴行列とする生成規則は全部で6種類存在する：

1.  $(AB, AAB)$ , 2.  $(AB, ABA)$ , 3.  $(AB, BAA)$
4.  $(BA, AAB)$ , 5.  $(BA, ABA)$ , 6.  $(BA, BAA)$ .

<sup>7</sup> $S$  および  $S^n = \begin{pmatrix} 1 & n \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  は随伴行列に対する条件  $(a+d)bc \neq 0$  を満たさないが、既約因子の中に  $U$  が少なくとも1個含まれれば、 $M$  はその条件を満たす。

これらの中で, 1, 2, 5, 6 は等価であり, かつ対称の条件を満たしている. これに対して, 3, 4 は共に非対称であり, しかも等価ではない. このように同じ随伴行列を持ちながら等価でない生成規則が存在する場合がある. というより, こうなるのが通常である.

この問題を解決するためには既約行列  $U, S$  に対応する生成規則を一意に指定するだけでよい:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \implies \sigma_U = (B, AB), \quad (12)$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \implies \sigma_S = (A, AB). \quad (13)$$

これによって可逆的自己相似格子の生成規則は随伴行列から一意に決められる. 具体的には, 式 (9) の形の随伴行列を持つ生成規則を

$$\sigma = \sigma_U \sigma_S \cdots \sigma_U \sigma_U \sigma_S \quad (14)$$

により定義すればよい. ここで重要なことは, 同じ随伴行列を持つ可逆的生成規則はこれ以外には存在しないことである. 以上により, 可逆的自己相似格子全体と unimodular な随伴行列全体とは一対一の関係がある.  $\sigma_U, \sigma_S$  は共に対称 (暗示的対称) であるから, これらの合成として表される可逆的生成規則は必ず対称になる [9].

前段で述べた理由により,  $M'_{SM}$  を随伴行列とする非対称生成規則 3, 4 は非可逆的である. unimodular な随伴行列を持つ対称生成規則で非可逆的なものも存在する. 実際,  $\sigma_S \sigma_S \sigma_U = (ABA, ABABA)$  は可逆的であるが, 同じ随伴行列を持つ  $(ABA, BAAAB)$  は非可逆的である. 後者は, 生成規則としては既約であり, 他の生成規則の合成として表すことはできない.

## 可逆的な生成規則の性質 2 : MLD 分類

幾何学的に一見異なった準結晶同士が, 局所的な変換によって互いに移り変わる場合がある. このような準結晶をひとつのクラスにまとめるような準結晶の分類法を考えることができる. このような分類を MLD (= Mutual Local Derivability) 分類と呼ぶ [12],[9]. 本節では幾何学的事には触れずに, 可逆的な生成規則によって作られた自己相似格子を分類することを考える. 可逆的自己相似格子全体を分類することと可逆的生成規則を分類することは同じである.

まず, 式 (10) の後の 2 個の随伴行列の因子  $U, S$  は互いに逆順となっている. これらを随伴行列とする可逆的生成規則は次のようになる:

$$\sigma_{SM} = \sigma_U \sigma_S = (B, BAB), \quad \sigma'_{SM} = \sigma_S \sigma_U = (AB, AAB). \quad (15)$$

これらの生成規則によって作られる自己相似格子  $\Lambda_{SM}, \Lambda'_{SM}$  を見てみよう (図 1). Silver-



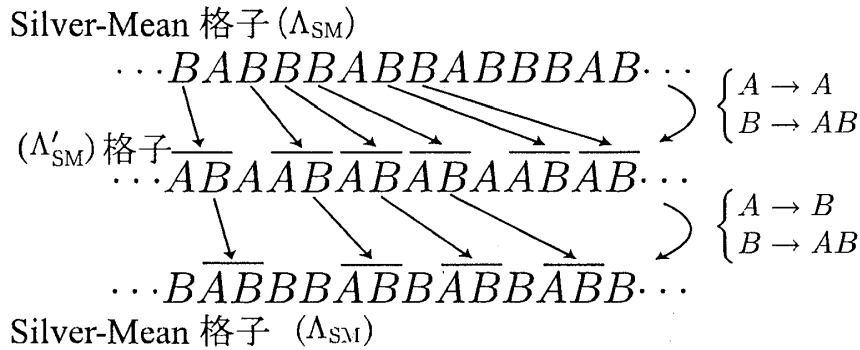


図 1: MLD の例

Mean 格子 ( $\Lambda_{SM}$ ) の文字列が一番上である. 図 1 のように  $(A \rightarrow A, B \rightarrow AB)$  と変換すると真中の文字列となる. これは,  $\Lambda'_{SM}$  の文字列に他ならない. さらに真中の文字列の  $A, B$  を  $(A \rightarrow B, B \rightarrow AB)$  と変換するともとの Silver-Mean 格子に復帰する. このときの 2 つの格子  $\Lambda_{SM}, \Lambda'_{SM}$  を結ぶ規則を置換規則 (Substitution Rule) と呼ぶ:

$$\Lambda_{SM} \xrightarrow{\sigma_S} \Lambda'_{SM} \xrightarrow{\sigma_U} \Lambda_{SM}. \quad (16)$$

$\Lambda_{SM}$  と  $\Lambda'_{SM}$  は置換規則によって関係付けられていて, 同じクラスに分類される. このようなクラスを MLD 類と呼ぶ.

Silver-Mean 格子に限らず, 任意の可逆的生成規則が与えられた場合, それと同じ MLD 類に属する生成規則を求めることができる. 随伴行列全体と可逆的生成規則全体は一対一の関係があるので随伴行列だけで議論を行う.  $M_1 = USSUSU$  とすると

$$\begin{aligned} M_2 &= SSUSUU, & M_3 &= SUSUUS, & M_4 &= USUUSS, \\ M_5 &= SUUSSU, & M_6 &= UUSSUS \end{aligned}$$

はすべて同じ MLD に属す. この例からもわかるが, 随伴行列  $M$  を構成する  $S, U$  の並び順をサイクリックに変えることによって生ずる随伴行列によって指定できる自己相似格子はすべて同じ MLD 類に属していることがわかる. 随伴行列の既約因子の数が  $n$  であれば, 対応する MLD 類は  $n$  個の自己相似格子を含む.

生成規則と 1 次元準結晶との繋がりについては参考文献 [9] を参照されたい. また, 2 次元以上の準結晶の MLD 分類については参考文献 [13] を参照されたい.

### 3.3 非可逆な生成規則

非可逆的 (非可逆) な場合も可逆的な場合と同様に MLD 分類が可能である [14]. 既約行列は可逆的生成規則のときの 2 つ  $U, S$  だけではなく, 無限個 ある. 非可逆的生成規則

の場合に初めて登場する既約行列 (因子) で最も単純なものは次のものである :

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

対応する生成規則  $\sigma_D = (AA, B)$  は周期格子を生成するが, この生成規則を因子として含む生成規則は非可逆的になる. 例えば, 次に示す PD 格子と Copper-Mean 格子がその例である :

$$\sigma_{\text{CM}} = \sigma_D \sigma_U = (B, AAB), \quad \sigma_{\text{PD}} = \sigma_U \sigma_D = (BB, AB). \quad (18)$$

この2つの格子は MLD の関係にある :

$$M_{\text{PD}} = UD = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \iff M_{\text{CM}} = DU = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

$\sigma_D = (AA, B)$  を含む3個の生成規則の合成として表される生成規則としては, 例えば

$$\sigma_D \sigma_U \sigma_S = (B, BAAB), \quad \sigma_U \sigma_D \sigma_U = (AB, AB BB) \quad (20)$$

などがある. それぞれが属する MLD 類は3個の生成規則 (自己相似格子) から成る. ついでながら, 上記の2つの生成規則の随伴行列は次のようになる :

$$DUS = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad UDU = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

これらのように,  $U, S$  以外に  $D$  を1個だけ既約因子として含む随伴行列の行列式は  $\pm 2$  となる.

既約行列としては, 他にも

$$D_j = \begin{pmatrix} j & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, \dots \quad (22)$$

など無限個存在する. ただし,  $j$  は素数とする. 従って, 生成規則の大多数は非可逆的なものであることがわかる.

ここまで議論してきた自己相似格子の分類をまとめる. 生成規則は対称性によって分けられる. 対称な生成規則はさらに, 可逆的なものと非可逆的なものに分類することができる. また, 生成規則が既約な生成規則の積に分解できる場合, 合成の順序をサイクリックに変えることにより同じ MLD 類に属する異なる生成規則が得られる.

これまでの MLD 分類では, 置換規則によって関係付けられている2種の自己相似格子を互いに MLD とした. この場合, 置換規則については何の制限も課さなかった. 置換規則を可逆的なものに制限したものを強い MLD 関係と定義すれば, 新しい MLD 分類が定義される. 2種の自己相似格子が互いに強い意味で MLD 関係にあれば, それらはこれまでの意味でも MLD 関係にあるが, 逆は必ずしも成り立たない. 例えば, 2個の生成規則

(または置換規則)  $\sigma_1, \sigma_2$  の合成である 2 つの生成規則,  $\sigma = \sigma_1\sigma_2, \sigma' = \sigma_2\sigma_1$  がある場合,  $\sigma_1$  と  $\sigma_2$  のどちらか一方が可逆的ならば,  $\sigma$  と  $\sigma'$  は互いに強い意味で MLD 関係にあるが, 両方とも非可逆的ならば, 強い意味での MLD 関係はない.  $\sigma_U, \sigma_S$  以外に  $\sigma_D$  を 1 個だけ既約因子として含む生成規則の場合に限定すると, どちらの MLD 関係で考えても同じであるが,  $\sigma_D$  を 2 個以上含む生成規則の場合には事情が異なる.

### 3.4 自己相似格子の性質

#### 自己相似格子の構造

生成規則を  $\sigma = (u(A, B), v(A, B))$ , 随伴行列を  $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$  とする. また, 第 0 世代の並びを  $A_0 = A, B_0 = B$  とし, 第  $n$  世代目の並びをそれぞれ  $A_n, B_n$  とする:  $A_n = \sigma^n(A), B_n = \sigma^n(B)$ . 今後の議論では, 補助記号  $C$  を  $C = AB$  として導入し, その第  $n$  世代を  $C_n$  とする:  $C_n = \sigma^n(C) = A_n B_n$ . 定義により, 漸化式

$$A_{n+1} = u(A_n, B_n), \quad B_{n+1} = v(A_n, B_n) \quad (23)$$

が成り立つ. 第  $n$  世代の並び  $A_n, B_n, C_n$  のサイズ (構成している  $A$  と  $B$  の総数) をそれぞれ  $L_n^{(A)}, L_n^{(B)}, L_n^{(C)}$  とする. 定義により,  $L_n^{(C)} = L_n^{(A)} + L_n^{(B)}$  が成り立つ. また, 漸化式  $(L_{n+1}^{(A)} \ L_{n+1}^{(B)}) = (L_n^{(A)} \ L_n^{(B)})M$  が成り立つ. この式と, 初期条件  $(L_0^{(A)} \ L_0^{(B)}) = (1 \ 1)$  から次式が導かれる:

$$(L_n^{(A)} \ L_n^{(B)}) = (1 \ 1)M^n. \quad (24)$$

次に, Fibonacci 格子 ( $\sigma = (B, AB)$ ) の場合を例にあげる<sup>8</sup>:

$$\begin{cases} A_1 = B \\ B_1 = AB \end{cases} \quad \begin{cases} A_2 = AB \\ B_2 = BAB \end{cases} \quad \begin{cases} A_3 = BAB \\ B_3 = ABBAB \end{cases} \quad \begin{cases} A_4 = ABBAB \\ B_4 = BABABBAB \end{cases} \quad \dots \quad (25)$$

自己相似格子は  $A, B$  の無限並びであるが, それを適当にくくり直すと, 任意の  $n$  に対して, 第  $n$  世代の並び  $A_n$  と  $B_n$  の無限並びに変換できる. しかも, 後者の並びは前者の並びと同じ規則に従っている. 例えば, 式 (1) に含まれる  $A$  と  $B$  をそれぞれ  $A_n$  と  $B_n$  で置き換えると, 各並びは世代が  $n$  だけずれた並びに変換される. 自己相似格子は周期的ではないが, ここで述べた事情により, 周期格子に近い性質を持つと言える. また, 周期格子に次いで構造的一様性が強い. この点で, 確率的に任意の大きさの揺らぎが可能なランダム系とは異なっている.

$A, B, C$  の中の任意のひとつを  $X$  とする. 前段で述べた自己相似格子の性質のため,  $n$  を十分大きくとった場合, 自己相似格子は  $X_n$  の無限並びとして表される周期格子により「近似」することができる. この周期格子を前者の近似格子と呼ぶ. この近似格子の周

<sup>8</sup>Fibonacci 格子の場合,  $A_n = B_{n-1} = C_{n-2}$  が成り立つ.

期は  $L_n^{(X)}$  に等しい. このようにして, 3種類の近似格子の系列が得られる.  $X_n$  に含まれる  $A$  と  $B$  の個数をそれぞれの  $N_n^{(A)}$ ,  $N_n^{(B)}$  と表すと, 次式が成り立つ:

$$\begin{pmatrix} N_{n+1}^{(A)} \\ N_{n+1}^{(B)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_n^{(A)} \\ N_n^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (26)$$

$r \equiv \text{Tr } M$ ,  $s \equiv \det M$  とおけば, 随伴行列  $M$  の特性多項式は  $\det(xE - M) = x^2 - rx + s$  となる. この2次式の判別式  $D = r^2 - 4s$  は正整数である<sup>9</sup>. また,  $M$  が unimodular であることと  $s = \pm 1$  であることは等価である. 随伴行列  $M$  の固有値を  $\tau, \tau'$  ( $|\tau| > |\tau'|$ ) とする. この固有値は2次方程式  $x^2 - rx + s = 0$  根であるから,  $\tau + \tau' = r$ ,  $\tau\tau' = s$  が成り立つ. 判別式  $D$  が平方数ならば,  $\tau, \tau'$  は共に整数となり, さもなければ,  $\tau, \tau'$  は共に2次実無理数 ( $\tau'$  は  $\tau$  の代数的共役) となる. このような  $\tau$  で 3.5 を超えないものは 10 個存在するが, それらを小さい順にリストする:  $(1 + \sqrt{5})/2$  (黄金比),  $2$ ,  $1 + \sqrt{2}$ ,  $(1 + \sqrt{13})/2$ ,  $(3 + \sqrt{5})/2$ ,  $1 + \sqrt{3}$ ,  $3$ ,  $(3 + \sqrt{13})/2$ ,  $2 + \sqrt{2}$ ,  $1 + \sqrt{5}$ .

$M$  はケーリー・ハミルトンの関係式  $M^2 = rM - sI$  を満たすので,  $L_n^{(A)}$ ,  $L_n^{(B)}$  は次の漸化式 (差分方程式) の解となる:

$$x_{n+1} = rx_n - sx_{n-1}. \quad (27)$$

この漸化式の解で, 初期条件  $x_0 = 0, x_1 = 1$  を満たすものは整数列を表すが, この数列のメンバーは一般化 Fibonacci 数と呼ばれる<sup>10</sup>.  $n$  番目の一般化 Fibonacci 数を  $\Phi_n$  と記すと, それは

$$\Phi_n \equiv \frac{1}{\sqrt{D}}(\tau^n - \tau'^n) \quad (28)$$

と表すことができる. これを用いると,  $L_n^{(A)}$ ,  $L_n^{(B)}$  は次のように表すことができる:

$$L_n^{(A)} = \Phi_{n+1} + (c - d)\Phi_n, \quad L_n^{(B)} = \Phi_{n+1} + (b - a)\Phi_n. \quad (29)$$

自己相似格子の構造は  $\tau$  の数論的性質に強く規定される. 特に重要なのは, 不等式  $0 < |\tau'| \leq 1$  が満たされる場合である. このような2次無理数  $\tau$  は Pisot 数と呼ばれる<sup>11</sup>. 関係式  $\tau\tau' = s (= \det M)$  により, 特に  $M$  が unimodular ならば,  $\tau$  は必ず Pisot 数となる. 例えば, 前記のリスト中の8個の無理数のうち6個は Pisot 数であるが, その中で  $s = \pm 1$  とならないのは,  $1 + \sqrt{3}$ ,  $2 + \sqrt{2}$  の2例のみである. この2例については,  $|\tau\tau'| = 2$  が成り立つ.  $\tau = 1 + \sqrt{3}$  または  $\tau = 2 + \sqrt{2}$  となる生成規則としては, それぞれ式 (20) の左側および右側がある. 本論文の議論は原則として, 対称自己相似格子で  $\tau$  が Pisot 数

<sup>9</sup>自己相似格子の生成規則の中には判別式がゼロとなるものもあるが (例えば, Thue-Morse 格子の生成規則:  $(AB, BA)$ ) これらは極めて特殊なので, 本稿では無視する.

<sup>10</sup> $r = 1$ ,  $s = -1$  の場合が Fibonacci 数である:  $x_{n+1} = x_n + x_{n-1}$ .

<sup>11</sup> $\tau' = \pm 1$  の場合,  $\tau$  は整数となり Pisot 数ではない. しかしながら, このケースは Pisot 数の場合と同様の議論ができるためにいっしょに扱う. PD 格子と Copper-Mean 格子がその例で, この場合  $\tau = 2$  となる.

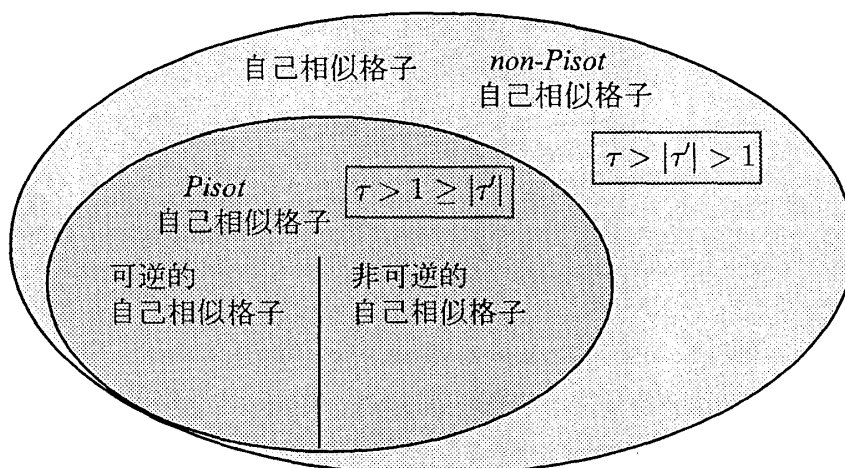


図 2: 自己相似格子の分類

の場合に限定する. 可逆的自己相似格子は必ず Pisot 自己相似格子となるが, その逆は必ずしも成り立たない. 式 (20) の 2 つの生成規則により作られる 2 種の自己相似格子は, 代表的な非可逆的 Pisot 自己相似格子である.

$\tau$  が 2 次無理数でかつ Pisot 数でもある場合, 式 (28) の括弧の中の第 2 項は  $n \rightarrow \infty$  の極限で消える. 従って, 式 (28), (29) により,  $L_n^{(A)}$ ,  $L_n^{(B)}$  は, 世代  $n$  の関数として次のような漸近的振る舞いを示す:

$$L_n^{(A)} \approx \frac{\rho}{\sqrt{D}} \tau^n, \quad L_n^{(B)} \approx \frac{\rho'}{\sqrt{D}} \tau^n. \quad (30)$$

ただし, 右辺の比例係数  $\rho = \tau + c - d$ ,  $\rho' = \tau - a + b$  は正の数である. この漸近式の誤差は  $n \rightarrow \infty$  の極限で消える. そのため, Pisot 自己相似格子は他の自己相似格子よりも構造的一様性が強いと言える [15].

式 (30) により,  $L_n^{(A)}$ ,  $L_n^{(B)}$ ,  $L_n^{(C)}$  の中の任意のひとつを  $L_n$  とした場合,  $L_{n+1}/L_n$  は  $n \rightarrow \infty$  の極限で  $\tau$  に収束し, 従って,  $p$  を正整数とすれば,  $L_{n+p}/L_n$  は  $\tau^p$  に収束する. いずれにせよ, 生成規則により世代が 1 段上がることは, 空間スケールが  $\tau$  倍だけ増加することに対応する. これらの結果は, 式 (24) の帰結と言えるが, 式 (26) を用いた同様な議論により,  $N_{n+1}^{(A)}/N_n^{(A)}$ ,  $N_{n+1}^{(B)}/N_n^{(B)}$  も  $n \rightarrow \infty$  の極限で  $\tau$  に収束することが言える. また,  $N_n^{(B)}/N_n^{(A)}$  が同じ極限で  $\omega \equiv (\tau - a)/b = c/(\tau - d)$  に収束することも言える<sup>12</sup>. 従って,  $\omega$  は当該生成規則で作られた自己相似格子の  $A$  と  $B$  の個数の比と一致する. 特に,  $\omega$  が無理数である場合, このような格子は周期格子ではあり得ない.

<sup>12</sup> $\omega$  は次式を満たす:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \end{pmatrix} = \tau \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \end{pmatrix}. \quad (31)$$

なお,  $\rho'/\rho = b\omega/c$  が成り立つ.

## 構造因子

式(30)の直後で述べたことの結果として, Pisot 自己相似格子の構造因子  $S(Q)$ <sup>13</sup> は Bragg peak だけから成ることが示される [15],[16].  $S(Q)$  の性質を述べるためには, 2 次の無理数  $\tau$ ,  $\omega$  に関連した 2 次体の数論に関するいくつかの用語が必要になる. これについては, 付録 2 次体の数論を参照されたい. Pisot 自己相似格子の構造因子  $S(Q)$  の peak 位置の波数は, この格子の逆格子ベクトルと言える. 逆格子ベクトル全体  $\mathcal{M}$  は加群であり, Fourier module と呼ばれる. 自己相似格子は非周期的なので,  $\mathcal{M}$  は実数軸上密 (dense) となる<sup>14</sup>. 以下, 波数は有理化波数  $\kappa = Q/(2\pi)$  を用いて議論する. ただし, 格子定数を 1 とした.  $\kappa$  が逆格子ベクトルであるための必要十分条件は,  $n \rightarrow \infty$  の極限で  $\kappa L_n^{(A)}$  と  $\kappa L_n^{(B)}$  の小数部分<sup>15</sup> が共にゼロに収束することである. この条件により,  $\mathcal{M}$  は次のように決定される [15],[16]:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{1+\omega} \mathbf{Z}\{\omega\}. \quad (32)$$

ただし,  $\tau$  が unit ならば

$$\mathcal{M} = \frac{1}{1+\omega} \mathbf{Z}[\omega] \quad (33)$$

となる.  $\mathcal{M}$  は  $\mathbf{Z}$ -module であるが, その生成元 (基底) は前者の場合には無限個となるが, 後者の場合には 2 個となる. 従って, 後者の場合には系は準周期的 (quasiperiodic) である<sup>16</sup>. これに対して, 前者のような系は limit quasiperiodic system (極限準周期系) と呼ばれる. 式(20)の 2 つの生成規則により作られる 2 種の自己相似格子は limit quasiperiodic system である.  $n$  を任意の整数とした場合,  $n + n\omega \in \mathbf{Z}\{\omega\}$  であるから, 式(32)により,  $n$  は逆格子ベクトルとなる. このことは, 自己相似格子が格子定数 1 の周期格子に乗っているとしたことからの当然の帰結である. このことから, Fourier module  $\mathcal{M}$  が, その半開き単位区間  $[0, 1)$  への制限  $\mathcal{M}_{[0,1)}$ <sup>17</sup> を元にして, それを周期的にずらしたものの全体の合併として表されることが分かる<sup>18</sup>. このことは, 集合  $\mathcal{M}$  の並進対称性を表すが, この集合は原点 (従って, すべての整数点) を中心とする反転対称性も持つ. これらの結果として, すべての半整数点を中心とする反転対称性も持つ.

<sup>13</sup>  $\delta_A(j)$  をサイト  $j$  が  $A$  ならば 1,  $B$  ならば 0 をとる関数とした場合, 構造因子は次式で定義される:

$$S(Q) \equiv \frac{1}{2N} \lim_{N \rightarrow \infty} \left| \sum_{j=-N}^N \delta_A(j) \exp(-iQj) \right|^2.$$

<sup>14</sup> 周期格子の場合, その周期を  $a$  とすれば,  $\mathcal{M} = \{ng | n \in \mathbf{Z}\}$ ,  $g = 2\pi/a$  と表され, 離散的である.

<sup>15</sup> 任意の実数は, 四捨五入による整数部分と残りの小数部分に一意に分解できる.

<sup>16</sup> 基底となる 2 つの波数の一方は  $g_1 = 1/(1+\omega)$  となり, 他方は  $g_2 = \omega g_1$  となる. 従って,  $\mathcal{M} = \{n_1 g_1 + n_2 g_2 | n_1, n_2 \in \mathbf{Z}\}$  となる. 準周期性は  $\omega$  が無理数であることによる.

<sup>17</sup>  $X$  を実数から成る集合とした場合,  $X_{[0,1)} \equiv X \cap [0, 1) = \{x | x \in X, 0 \leq x < 1\}$  とする.

<sup>18</sup> 記号的には,  $\mathcal{M} = \cup_{n \in \mathbf{Z}} (n + \mathcal{M}_{[0,1)})$  と表すことができる.

他方,  $\tau = (\text{整数}), |\tau| = 1$  である場合も同様の議論から, 逆格子ベクトル全体  $\mathcal{M}$  は次のように決定される [15],[16]:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = \mathbf{Z}\{\tau\} &\equiv \mathbf{Z} \cup \frac{1}{\tau}\mathbf{Z} \cup \frac{1}{\tau^2}\mathbf{Z} \cup \dots \\ &= \left\{ n_0 + \frac{n_1}{\tau} + \frac{n_2}{\tau^2} + \dots \quad (\text{有限項で切れる}) \mid n_j \in \mathbf{Z} \right\}. \end{aligned} \quad (34)$$

この場合も  $\mathcal{M}$  の生成元 (基底) は無限個となる. このような系は limit periodic system (極限周期系) と呼ばれる.

以上により, Fourier module  $\mathcal{M}$  は随伴行列  $M$  から一意に決定される. 従って, 随伴行列が共通な自己相似格子が複数個存在する場合, それらは同一の Fourier module を持つ. なお, 非 Pisot 格子の  $S(Q)$  は特異連続 (singular continuous) となる<sup>19</sup>ことが知られている [15],[16].

## 4 自己相似格子の一電子状態

自己相似格子の一電子状態を強結合近似を用いて調べる. Hamiltonian  $\mathcal{H}$  の  $j$  番目のサイトのポテンシャルを  $V_j$  とすれば,

$$\mathcal{H} = - \sum_j t (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) + \sum_j |j\rangle V_j \langle j| \quad (35)$$

と与えられる.  $t (> 0)$  は transfer (hopping) integral の値で,  $V_j$  は  $j$  番目のサイトが  $A$  か  $B$  かにより,  $V_A$  または  $V_B$  をとる.  $j$  番目のサイトの振幅を  $\phi_j$  とした場合, それらは次の3項間漸化式を満たす:

$$-t\phi_{j+1} - t\phi_{j-1} + V_j\phi_j = E\phi_j. \quad (36)$$

煩雑さを避けるため, 以後  $t = 1$  ととる.

自己相似格子の1サイトあたりの状態密度  $D(E)$  は, 後述するように, 特異性の強い関数となる. そのため,

$$H(E) = \int_{-\infty}^E D(E) dE \quad (37)$$

で定義される積分状態密度  $H(E)$  の方がより扱いやすい関数となる.  $H(E)$  は全体の状態数のうち,  $E$  を超えない状態の数の割合を表す. 定義により,  $H(E)$  は  $E$  の非減少関数で, 全体のバンドの下端以下では  $H(E) = 0$  となり, 上端以上では  $H(E) = 1$  となる.

<sup>19</sup>フラクタル的関数のこと

## 4.1 transfer matrix

3項漸化式(36)により,  $j$  番目と  $j-1$  番目のサイトの振幅  $\phi_j, \phi_{j-1}$  を決めれば, 任意の整数  $m > 0$  に対して,  $j+m$  番目と  $j+m-1$  番目のサイトの振幅  $\phi_{j+m}, \phi_{j+m-1}$  が  $\phi_j, \phi_{j-1}$  の線形変換 (1次結合) として与えられる. この線形変換を

$$(\phi_{j+m} \ \phi_{j+m-1}) = (\phi_j \ \phi_{j-1})T \quad (38)$$

と表した場合, その変換行列  $T$  ( $2 \times 2$  行列) は transfer matrix と呼ばれる. 式(36)により,  $m=1$  の場合は,  $T = T_j$  はサイト  $j$  に依存し,

$$T_j = \begin{pmatrix} V_j - E & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

となる. 具体的には,

$$T_A = \begin{pmatrix} V_A - E & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_B = \begin{pmatrix} V_B - E & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (40)$$

とすれば, サイト  $j$  のタイプにより,  $T_j = T_A$  または  $T_B$  となる. また,  $\det T_j = 1$  を満たす. 一般の  $m$  の場合の  $T$  は,  $j$  番目から  $j+m-1$  番目のサイトまでの区間における  $A$  と  $B$  の並びだけでできまり, その並びの出発点  $j$  には依存しない. この並びを  $X$  とし, それが2つの並び  $Y, Z$  に分解できる ( $X = YZ$ ) ならば, 対応する3個の transfer matrix は関係式  $T_X = T_Y T_Z$  により結ばれる. 従って,  $X$  における  $A$  と  $B$  の並びから, それと同じ順番に  $T_A$  と  $T_B$  の積を計算すれば  $T_X$  が求められる. このように  $A$  と  $B$  の任意の並びに対して, 対応する transfer matrix が定まる. そのため, transfer matrix は常に unimodular である:  $\det T = 1$ . 第  $n$  世代の並び  $A_n, B_n, C_n$  に付随する transfer matrix を  $T_A^{(n)}, T_B^{(n)}, T_C^{(n)}$  とする. 関係する生成規則を  $\sigma = (u(A, B), v(A, B))$  とすれば, 式(23)により, 次の漸化式が成り立つ:

$$T_A^{(n+1)} = u(T_A^{(n)}, T_B^{(n)}), \quad T_B^{(n+1)} = v(T_A^{(n)}, T_B^{(n)}) \quad (41)$$

また, 関係式  $T_C^{(n)} = T_A^{(n)} T_B^{(n)}$  が成り立つ. 例えば, Fibonacci 格子の場合,  $T_A^{(n+1)} = T_B^{(n)}$ ,  $T_B^{(n+1)} = T_A^{(n)} T_B^{(n)}$  が成り立つ.  $T_A$  と  $T_B$  はエネルギー  $E$  の関数であるから,  $T_A^{(n)}, T_B^{(n)}, T_C^{(n)}$  もそうである.

特に, 周期系 ( $V_A = V_B = 0$ ) の場合,  $T_A = T_B (\equiv T_0)$  となるから, 並び  $X$  のサイズを  $L$  と表せば,  $T_X = T_0^L$  が成り立つ.

## 4.2 近似格子の電子状態

近似格子は周期格子なので, その周期を  $L$  とすれば, エネルギースペクトルは  $L$  個のエネルギーバンドから構成される. また, 固有状態 (波動関数) はブロッホの定理を満た



す： $\phi_{j+L} = e^{iQL}\phi_j$ . ただし,  $Q$  は波数を表す. このことから, 1 周期の transfer matrix を  $T$  とすると, 次の関係式が成り立つことがわかる:

$$(\phi_j \ \phi_{j-1})T = (\phi_{j+L} \ \phi_{j+L-1}) \quad (42)$$

$$= e^{iQL}(\phi_j \ \phi_{j-1}). \quad (43)$$

従って,  $e^{\pm iQL}$  は  $T$  の固有値となる. よって,  $\text{Tr } T = 2 \cos QL$  が結論される. そこでエネルギー  $E$  の関数を

$$\zeta(E) \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } T(E) \quad (44)$$

により定義すれば,  $\zeta(E)$  は  $E$  の  $L$  次多項式となるから<sup>20</sup>, 方程式

$$\zeta(E) = \cos QL \quad (45)$$

の解として,  $L$  個の分散関係式  $E = E_i(Q)$ ,  $i = 1, 2, \dots, L$  が得られる. これらの式から  $L$  個のエネルギーバンドが得られる.  $\zeta(E)$  は  $T(E)$  と同様, 近似格子の 1 周期における  $A$  と  $B$  の並び  $X$  により決定される. 例えば,  $X = AB$  ならば,  $\zeta(E) = (V_A - E)(V_B - E)/2 - 1$  となり, 2 個の分散関係式は 2 次方程式の解として求められる. 3 種類の近似格子の系列のどれかひとつの系列に対して, そのバンドが世代と共にどのように変化するかを調べれば自己相似格子のエネルギースペクトルが解明できる.

ここで, 式 (44) で定義される変数  $\zeta$  が次の 3 変数の整数係数多項式となることを示す:

$$x \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(T_A), \quad y \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(T_B), \quad z \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(T_C) = \frac{1}{2} \text{Tr}(T_A T_B). \quad (46)$$

$T_A$  は unimodular なので, ケーリー・ハミルトンの関係式は  $(T_A)^2 = 2xT_A - 1$  と表される<sup>21</sup>.  $T_B$  や  $T_C$  についても同様である. 問題の証明は, この事実と trace の性質を用いて, 並び  $X$  のサイズ  $L$  に関する帰納法により行う. 必要な trace の性質は線形性 ( $\text{Tr}(U + V) = \text{Tr } U + \text{Tr } V$ ) と循環性 ( $\text{Tr } UV = \text{Tr } VU$ ) である.  $L = 1$  および  $L = 2$  の場合は自明であるから,  $L \geq 3$  の場合を考えればよい. ところで, 並び  $X$  の中に  $A$  または  $B$  が連続して含まれている場合,  $T$  の対応する因子に対してケーリー・ハミルトンの関係式を用い, さらに trace の線形性を用いれば, サイズ  $L$  がより小さい場合に帰着する. また,  $X$  の最初と最後が共に  $A$  (または  $B$ ) の場合には, trace の循環性を用いることにより, 直前の場合に帰着する. 残されたのは  $L$  が偶数で  $X = ABAB \dots AB$  となる場合だけである. この場合,  $X$  は  $C = AB$  の連続並びとなっているので,  $T_C$  についてのケーリー・ハミルトンの関係式を必要な回数使用すると  $L = 2$ ,  $X = C (= AB)$  の場合に帰着する. 以上で証明は完了した.

<sup>20</sup> $T(E)$  の行列成分  $T_{11}(E)$ ,  $T_{12}(E)$ ,  $T_{21}(E)$ ,  $T_{22}(E)$  は  $E$  の多項式となり, その次数はそれぞれ  $L$ ,  $L - 1$ ,  $L - 1$ ,  $L - 2$  となる. 証明は  $L$  に関する帰納法を用いる.

<sup>21</sup>以下の議論では,  $T_A$  と  $T_B$  が unimodular であることだけが重要であり, これらが式 (40) の表示を持つことは使用されない.

具体的な例として,  $X = ABBABA$  の場合について計算する :

$$\begin{aligned}
 \zeta(E) &= \frac{1}{2} \text{Tr}[\mathcal{T}_A(\mathcal{T}_B)^2 \mathcal{T}_A \mathcal{T}_B \mathcal{T}_A] = \frac{1}{2} \text{Tr}[(2x\mathcal{T}_A - \mathbf{1})(2y\mathcal{T}_B - \mathbf{1})\mathcal{T}_A \mathcal{T}_B] \\
 &= 2xy \text{Tr}[\mathcal{T}_A \mathcal{T}_B \mathcal{T}_A \mathcal{T}_B] - x \text{Tr}[\mathcal{T}_A \mathcal{T}_A \mathcal{T}_B] - y \text{Tr}[\mathcal{T}_B \mathcal{T}_A \mathcal{T}_B] + \frac{1}{2} \text{Tr}[\mathcal{T}_A \mathcal{T}_B] \\
 &= 2xy \text{Tr}[(\mathcal{T}_C)^2] - x(2x \text{Tr}[\mathcal{T}_C] - \text{Tr}[\mathcal{T}_B]) - y(2y \text{Tr}[\mathcal{T}_C] - \text{Tr}[\mathcal{T}_A]) + \frac{1}{2} \text{Tr}[\mathcal{T}_C] \\
 &= z(8xyz - 4x^2 - 4y^2 + 1). \tag{47}
 \end{aligned}$$

なお, 後節における議論の都合上, いくつかの公式を記しておく. まず,  $\mathcal{T}_A$  に対するケーリー・ハミルトンの関係式は  $\mathcal{T}_A + (\mathcal{T}_A)^{-1} = 2x\mathbf{1}$  と書き換えられるが, この式から,  $\text{Tr}(\mathcal{T}_A) = \text{Tr}[(\mathcal{T}_A)^{-1}]$  が導ける. この等式は 2次元 unimodular 行列の一般的性質である. 従って, 例えば,  $\text{Tr}[\mathcal{T}_A(\mathcal{T}_B)^{-1}] = \text{Tr}[\mathcal{T}_B(\mathcal{T}_A)^{-1}]$  も成り立つ. 右辺に含まれる  $(\mathcal{T}_A)^{-1}$  を上記の変形ケーリー・ハミルトンの関係式を用いて消去し, 式 (46) を用いると, 右辺は  $4xy - 2z$  に等しいことがわかる. すなわち, 次の公式が証明できた :

$$J(x, y, z) \equiv 2xy - z \tag{48}$$

$$= \frac{1}{2} \text{Tr}[\mathcal{T}_A(\mathcal{T}_B)^{-1}] = \frac{1}{2} \text{Tr}[\mathcal{T}_B(\mathcal{T}_A)^{-1}]. \tag{49}$$

同様にして, 次の公式を証明することができる :

$$I(x, y, z) \equiv x^2 + y^2 + z^2 - 2xyz - 1 \tag{50}$$

$$= \frac{1}{8} \text{Tr}[\mathcal{T}_A, \mathcal{T}_B]^2 = \frac{1}{4} \text{Tr}[\mathcal{T}_A \mathcal{T}_B (\mathcal{T}_A)^{-1} (\mathcal{T}_B)^{-1}] - \frac{1}{2}. \tag{51}$$

特に,  $\mathcal{T}_A, \mathcal{T}_B$  が式 (40) により与えられる場合,  $[\mathcal{T}_A, \mathcal{T}_B] = \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\Delta = V_A - V_B$  が成り立つので, 次式を得る :

$$I = \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2. \tag{52}$$

### 4.3 trace map

3種類の近似格子の系列の第  $n$  世代の近似格子の場合には式 (44) により定義される量は次のようになる :

$$x_n \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{T}_A^{(n)}), \quad y_n \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{T}_B^{(n)}), \quad z_n \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{T}_C^{(n)}) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{T}_A^{(n)} \mathcal{T}_B^{(n)}). \tag{53}$$

ところで, 関係する生成規則を  $\sigma = (u(A, B), v(A, B))$  とすれば,  $\mathcal{T}_A^{(n+1)} = u(\mathcal{T}_A^{(n)}, \mathcal{T}_B^{(n)})$  が成り立つ (式 (41) 参照). 従って, 前節の議論と同様な議論により, 3変数整数係数多項式  $f(x, y, z)$  が存在し,  $x_{n+1} = f(x_n, y_n, z_n)$  と表すことができる.  $y_{n+1}, z_{n+1}$  について

も同様である。これらをまとめると次のようになる：

$$\begin{cases} x_{n+1} = f(x_n, y_n, z_n) \\ y_{n+1} = g(x_n, y_n, z_n) \\ z_{n+1} = h(x_n, y_n, z_n) \end{cases} \quad (54)$$

すなわち、3次元写像  $T(x, y, z) = (f(x, y, z), g(x, y, z), h(x, y, z))$  が存在し、関係式  $\mathbf{r}_{n+1} = T(\mathbf{r}_n)$ ,  $\mathbf{r}_n = (x_n, y_n, z_n)$  が成り立つ [7]。この写像は **trace map** と呼ばれている。例えば、式 (20) の右側の生成規則の場合の trace map は次のようになる：

$$T(x, y, z) = (z, (4y^2 - 1)z - 2xy, 8y^2z^2 - 4xyz - 2y^2 - 2z^2 + 1). \quad (55)$$

trace map で重要なことは、それが  $E, V_A, V_B$  に明示的には依存しないことである。しかしながら、その軌道  $\{\mathbf{r}_n\}$  は trace map の初期値

$$\mathbf{r}_0 = (x_0(E), y_0(E), z_0(E)) = \frac{1}{2}(V_A - E, V_B - E, (V_A - E)(V_B - E) - 2) \quad (56)$$

をとおして電子のエネルギー  $E$  に依存する。自己相似格子のエネルギースペクトルは、近似格子のエネルギースペクトルの周期  $L$  を無限大にした極限であるから、それは trace map の性質により強く規定される。式 (54) は 1 種の繰り込み変換であるが、自己相似格子が入れ子構造となっているために、その電子状態に繰り込み群的構造が導入される。1 回の繰り込み変換は自己相似格子の 1 回の変換（生成規則による）に対応するが、この変換では空間スケールが  $\tau$  倍になる。従って、繰り込み群で用いられるパラメタ  $\tau$  と一致する。 $E$  を決めたときに、trace map の軌道  $\{\mathbf{r}_n(E)\}$  が  $T^p$  ( $p \in \mathbb{N}$ ) の固定点に収束する場合、 $E$  は trace map の  $p$ -cycle と呼ばれる。

可逆的自己相似格子の場合の trace map は次のような著しい性質を持つ [11],[17]：

1. 1 対 1 の写像であり、逆写像が存在する。
2. 写像のヤコビアン<sup>1</sup>の絶対値が 1 となり、従って保存的である。
3. 式 (50) により定義される量  $I(x, y, z)$  が不変量となる。
4. 式 (52) により、不変量  $I(x, y, z)$  の値は正値で  $\Delta = V_A - V_B$  に依存する。
5. 不変量の存在により、trace map は曲面  $I = \text{const.}$  上の実質 2 次元写像となる。
6. 2 次元写像としての trace map は、第 4 項目のために 普遍的な写像ではない。

可逆的自己相似格子の生成規則  $\sigma$  は式 (14) のように、2 種の生成規則  $\sigma_U, \sigma_S$  の合成として表すことができる。そのため、対応する trace map  $T_\sigma$  は、対応する 2 種の trace map  $T_U, T_S$  の合成となる。ただし、trace map の合成は逆順となる。例えば、 $T_{SU} = T_U T_S$ 。従って、上記の性質の 1, 2, 3 を示すためには、 $T_U, T_S$  がこれらの性質を持つことを示せばよい。簡単な計算により、

$$T_U = (y, z, 2yz - x), \quad T_S = (x, z, 2xz - y) \quad (57)$$

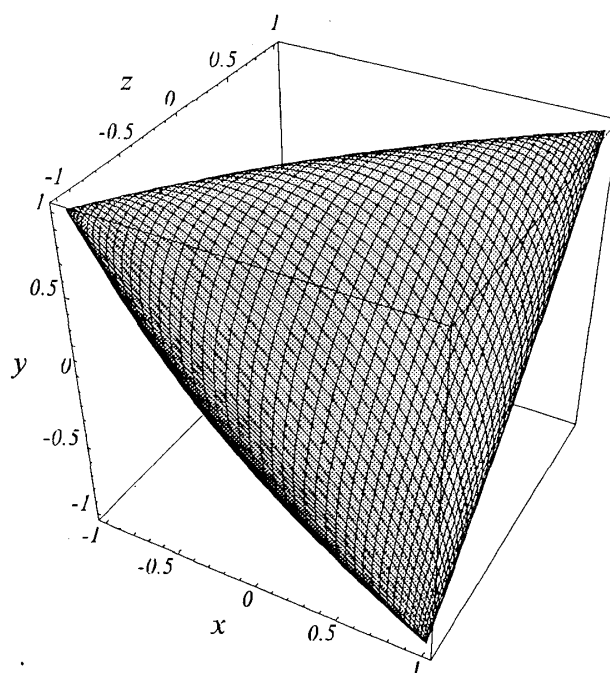


図 3: 不変量  $I$  がゼロの場合の trace map の不変曲面. この曲面は, 5 個のパーツのうち中心を占めるものであり, 4 個の点  $(1, 1, 1)$ ,  $(1, -1, -1)$ ,  $(-1, 1, -1)$ ,  $(-1, -1, 1)$  を頂点とするカスプを持つ.

を示すことができる. これらが, 上記の性質の 1, 2, 3 を持つことを示すことは容易である<sup>22</sup>.

可逆的自己相似格子の場合の trace map の不変量 (50) は, 3 次の項  $-2xyz$  を除いて球対称である. そのため, trace map の不変曲面  $I(x, y, z) = \text{const.}$  は正 4 面体的対称性を持つ. また, 方程式  $xyz = 0$  から決まる 3 枚の平面は 3 次曲面  $I = \text{const.}$  の漸近面となる. 定数 (const.) が負の場合, この 3 次曲面は 5 個の部分に分かれる. そのうちの 1 個は正 4 面体的に歪んだ球となり, その中心は原点にある. 残りの 4 個は開いた曲面で, 4 個の点  $(1, 1, 1)$ ,  $(1, -1, -1)$ ,  $(-1, 1, -1)$ ,  $(-1, -1, 1)$  を含む 4 個の象限の各々に含まれている<sup>23</sup>. 対称性により, これら 4 個の曲面は合同で向きだけが異なっている. 定数 (const.) を負の値からゼロに近づけると, 5 個の曲面はこれら 4 個の点方向に伸びてゆき, ゼロとなった時点でこれらの 4 個の点で接触する (図 3). この時点では, 互いに接触する 2 個の曲面はその接触点でカスプとなっている. これに対して, 定数 (const.) が正值の場合, 5 個の曲面が合体して, 1 枚の開いた曲面となる. 定数 (const.) が小さい場合には, 上記の 4 個の点付近で漏斗状となっている. 可逆的自己相似格子の trace map の軌道  $\{\mathbf{r}_n\} = \{\mathbf{r}_n(E)\}$  は  $\Delta$  の値で決まる開いた曲面の上に乗っている. エネルギー

<sup>22</sup>生成規則の可逆性により, 式 (41) は  $(T_A^{(n)}, T_B^{(n)})$  について「解く」ことができる. 性質 1 はこのことから示すことができる.

<sup>23</sup> 3次元空間は直交座標系により, 8 個の象限に分割される.

ベクトルはこの軌道が無限遠に発散しないようなエネルギーから構成される。

写像力学では写像が保存系であるか否かによって、写像の性質が大きく異なることが知られている。第3章第1節において生成規則を可逆的と非可逆的に分類したわけであるが、この分類こそが trace map の保存系、非保存系（散逸系）の分類に対応している。すなわち、生成規則が可逆的であれば trace map は保存系となり、非可逆的であれば非保存系になる。

$\sigma_1$  を可逆的生成規則（または置換規則）とし、 $\sigma_2$  が非可逆的生成規則（または置換規則）とした場合、2つの非可逆的生成規則、 $\sigma = \sigma_1\sigma_2$ 、 $\sigma' = \sigma_2\sigma_1$  は互いに強い意味でMLD関係にある。また、対応する2つの trace map は、 $T_\sigma = T_{\sigma_2}T_{\sigma_1}$  および  $T_{\sigma'} = T_{\sigma_1}T_{\sigma_2}$  と表される。仮定により、 $T_{\sigma_1}$  は1対1の写像であるから、2つの trace map  $T_\sigma$ 、 $T_{\sigma'}$  が定義する2種の実線形力学系は同値になる<sup>24</sup>。以上の議論は、 $\sigma_1$  と  $\sigma_2$  が共に可逆的生成規則（または置換規則）の場合も基本的には成り立つ。この場合、 $\sigma$  と  $\sigma'$  は共に可逆的生成規則となる。ところが、可逆的生成規則の trace map は不変量を持ち、しかもその値は trace map の初期値に依存する。そのため、生成規則  $\sigma$ 、 $\sigma'$  により生成される2つの自己相似格子の間のMLD関係がその電子状態に及ぼす効果は限られたものとなる。

trace map のより詳しい性質については、次節以下で議論する。

#### 4.4 trace map の軌道

関係式

$$[T_A^{(n+1)}, T_B^{(n+1)}] = P(x_n, y_n, z_n)[T_A^{(n)}, T_B^{(n)}] \quad \text{または} \quad (58)$$

$$[T_A^{(n+1)}, T_B^{(n+1)}] = P(x_n, y_n, z_n)[T_A^{(n)}, T_B^{(n)}]T_R^{(n)} \quad (59)$$

を満たす整数係数多項式  $P(x, y, z)$  が存在することを証明することができる [18]。ただし、前者は明示的に対称な場合で、後者は暗示的に対称な場合である。また、 $R$  は  $A$  または  $B$  を意味する。さらに、この多項式は、可逆的な場合には1または-1となり、非可逆的な場合にはその次数が1以上になる。これらの結果は、対称な自己相似格子に特有な性質であり、非対称な場合には成り立たない。上の等式と公式 (51) を用いると、恒等式

$$I(T(x, y, z)) \equiv [P(x, y, z)]^2 I(x, y, z) \quad (60)$$

を導くことができる。可逆的自己相似格子の場合に  $I(x, y, z)$  が trace map の不変量となることは、この式からも証明できる。非可逆的自己相似格子の場合でも、 $I(x_n, y_n, z_n)$  の符号は  $n$  によらないので、 $I(x, y, z)$  は半不変量と呼ばれる [7]<sup>25</sup>。半不変量の初期値

<sup>24</sup> $T_{\sigma_1}$  は1対1の可微分写像（=滑らかな写像）であり、 $T_\sigma = T_{\sigma_1}^{-1}T_{\sigma'}T_{\sigma_1}$  および  $T_{\sigma'} = T_{\sigma_1}T_\sigma T_{\sigma_1}^{-1}$  が成り立つ。

<sup>25</sup>非対称な自己相似格子の場合でも、恒等式  $I(T(x, y, z)) \equiv R(x, y, z)I(x, y, z)$  を満たす整数係数多項式  $R(x, y, z)$  が存在する [7],[19]。しかしながら、 $R(x, y, z) = [P(x, y, z)]^2$  とは表せないで、 $I(x, y, z)$  は半不変量とはならない。

$I(x_0, y_0, z_0)$  は, 式 (52) により, 正值なので, 半不変量は負値をとらない. たとえば, 非可逆的自己相似格子である PD 格子の場合,  $P(x, y, z) = 2y$  となる. 半不変量の場合,  $I(x, y, z)$  の値は保存されないが, 1 度  $I = 0$  となった場合, 以後常に  $I = 0$  にとどまる. 従って, 非可逆的自己相似格子の場合, 図 3 に示された曲面は trace map の不変曲面となる [20],[11]. 特に, 周期系の場合,  $\Delta = 0$  が成り立つから, 式 (52) により,  $I(x, y, z) \equiv 0$  となる. このことは, 周期系の場合, 初期状態 (56) が次の関係式を満たすことからも言える:

$$x_0 = y_0, \quad z_0 = 2x_0^2 - 1. \quad (61)$$

このような状態を初期状態とする trace map の軌道は不変曲面上に制限される. この軌道については, 後で詳しく解析する.

$A$  と  $B$  の並びがランダムな場合にアンダーソン局在が起こる原因は, transfer matrix  $T_A, T_B$  の間の非可換性に求められる [21]. 逆に, エネルギー  $E$  を適当に選んだときに両者が交換可能であれば, そのエネルギーに限り周期系と似た状況になる [22]. すなわち,  $E$  がエネルギースペクトルに属するならば, 対応する波動関数は広がった状態となる. 強結合近似の transfer matrix の場合にはそのようなエネルギーは存在しないが, 条件  $P(x_n, y_n, z_n) = 0$  を満たすエネルギー  $E$  が存在すれば, 第  $n+1$  世代の transfer matrix  $T_A^{(n+1)}, T_B^{(n+1)}$  は交換可能となる. 従って,  $E$  がエネルギースペクトルに属するならば, 対応する波動関数は広がった状態となる.  $n$  を変えれば, 異なった広がった状態が得られる場合がある. 多くの非可逆的自己相似格子が無限個の広がった状態を持つのは,  $P$  の次数が 1 以上になるからである [23],[24]. なお,  $P(x_n, y_n, z_n) = 0$  を満たすエネルギー  $E$  では,  $n$  を超えるすべての番号  $m$  に対して  $I(x_m, y_m, z_m) = 0$  となる.

特に, 周期系 ( $V_A = V_B = 0$ ) の場合,  $E = -2 \cos Q$  とすれば,  $\text{Tr } T_0 = 2 \cos Q$  となるから (4.1 節の最後の議論参照), サイズを  $L$  の並び  $X$  に対して  $\text{Tr } T_X = \text{Tr } T_0^L = 2 \cos QL$  が成り立つ<sup>26</sup>. 従って,  $\mathbf{r}_n = (x_n, y_n, z_n)$  の 3 成分は次のようになる:

$$x_n = \cos [2\pi\kappa L_n^{(A)}], \quad y_n = \cos [2\pi\kappa L_n^{(B)}], \quad z_n = \cos [2\pi\kappa L_n^{(C)}]. \quad (62)$$

ただし,  $Q = 2\pi\kappa$  とした. これが, 周期系の trace map の軌道となることは容易に確かめることができる. この式において特に,  $\kappa = 0$  とすることにより, 点  $(1, 1, 1)$  が trace map (54) の固定点であることが分かる. 式 (32) の導出の際に述べた事情により, trace map の軌道 (62) が固定点  $(1, 1, 1)$  に収束するための必要十分条件が  $\kappa$  が逆格子ベクトルであることであると言える.

## 4.5 自己相似格子の電子状態

自己相似格子の電子状態の一般的性質については, 次のことが知られている [10].

<sup>26</sup>  $T_0$  を対角化する表示を用いると, 容易に証明することができる.

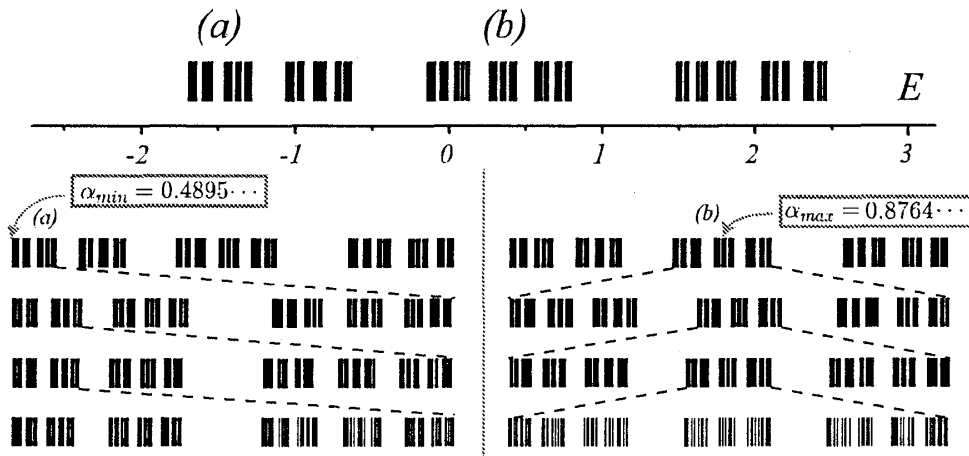


図 4: エネルギースペクトルの multifractal 構造. 上段は Fibonacci 格子のエネルギースペクトルである ( $V_A = 1, V_B = 0$ ). 第 18 世代 ( $B_{18}, L_n = 2584$ ) の Fibonacci 格子を周期的境界条件を課して計算を行った結果である. 下段は基底状態とバンド中心付近のエネルギースペクトルを拡大した図である. 拡大を繰り返すとギャップが見えてくる. また拡大するごとに一定のパターンに収束していく. 局所的自己相似性中心の代表は,  $H(E) = 0$  および  $H(E) = 1/2$  を満たす 2 つのエネルギーである. 前者は全体のバンドの左端で, 後者は「バンド中心」である.  $\alpha$  の値は解析的に求めた値であり, それぞれ  $\alpha$  の最大値と最小値に対応する.

- エネルギースペクトルは **multifractal** 構造 (singular continuous) である (図 4). これは, 式 (37) で定義される積分状態密度  $H(E)$  が「悪魔の階段」的になっていることと同値である (図 7).
- ほとんど全ての固有状態は**臨界状態**である (図 5, 6).

以上の 2 つの性質について以下でより詳しく説明する.

### multifractal 構造

fractal 構造の場合, 至る所に自己相似性が見られるが, multifractal とは, 局所的自己相似性の相似比が場所により異なるような集合をいう. multifractal 構造については付録 **multifractal 構造** で紹介するが, multifractal 構造とは局所次元を表す  $\alpha$  が単一の値ではなく図 20 (付録を参照) のように分布している構造と言える.

自己相似格子のエネルギースペクトルは図 4 のような multifractal 構造である. 至る所にギャップが入り込んでいる. 各ギャップの両端は周期系のエネルギースペクトルのバンド端に対応するので, 以下ではバンド端と呼ぶことにする. エネルギースペクトルの全体の集合の下端と上端も当然バンド端である.

エネルギースペクトルを  $\sigma$  とする.  $\sigma$  は multifractal なので, その局所次元  $\alpha$  の値

は  $\sigma$  の各点ごとに異なる.  $E \in \sigma$  を固定して, 積分状態密度  $H(E)$  を用いて  $g(\varepsilon) \equiv H(E + \varepsilon) - H(E)$  とした場合, 局所次元  $\alpha = \alpha(E)$  は, 漸近的關係式  $|g(\varepsilon)| \approx c|\varepsilon|^{\alpha(E)}$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) により定義される. もしも2つのパラメタ  $\lambda = \lambda(E)$ ,  $\mu = \mu(E)$  を含む關係式  $g(\varepsilon) \approx \mu g(\varepsilon/\lambda)$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) が成り立つならば,  $E$  は  $\sigma$  の局所的自己相似性の中心と呼ばれる (図4 参照). 局所的自己相似性中心における  $\alpha$  の値は, 関連する scaling parameters  $\lambda$ ,  $\mu$  を用いると次式で表される [25]:

$$\alpha = \frac{\ln \mu}{\ln \lambda}. \quad (63)$$

$\sigma$  の局所的自己相似性中心全体の集合  $\sigma_{\text{ls}}$  と  $\sigma$  のバンド端全体の集合  $\sigma_{\text{G}}$  は,  $\sigma$  を特徴付ける重要な対象となる. しかしながら,  $\sigma_{\text{ls}}$  あるいは  $\sigma_{\text{G}}$  自体を調べるよりも, それらに属するエネルギーにおける積分状態密度  $H(E)$  の値の分布のほう扱い易いことが知られている. 具体的には,  $S \equiv \{H(E) | E \in \sigma_{\text{ls}}\}$ ,  $G_{\sigma} \equiv \{H(E) | E \in \sigma_{\text{G}}\}$  により定義される2つの集合の性質が問題となる. 積分状態密度の最小値はゼロで最大値は1だから,  $S$  と  $G_{\sigma}$  は区間  $[0, 1]$  に含まれる.

$E \in \sigma_{\text{ls}}$  となるための必要十分条件は,  $E$  が trace map の cycle となることである. すなわち, trace map の cycle 全体の集合は  $\sigma_{\text{ls}}$  と一致する [2],[26],[27]. このとき, 対応する  $T^p$  の固定点における  $T^p$  のヤコビ行列<sup>27</sup>の固有値のうち絶対値が最大のもを  $\lambda_{\text{max}}$  とすれば, 局所次元  $\alpha = \alpha(E)$  は式 (63) において,  $\lambda = |\lambda_{\text{max}}|$ ,  $\mu = \tau^p$  とおくことにより求められる [25]. このようにして, すべての局所的自己相似性の中心のエネルギーで局所次元を求めることができる.

エネルギースペクトル  $\sigma$  における  $\alpha$  の分布は,  $f(\alpha)$ -spectrum によって特徴づけることができる.  $f(\alpha)$  の台 (support) は, 閉区間  $[\alpha_{\text{min}}, \alpha_{\text{max}}]$  となるが, それは単位区間  $I \equiv [0, 1]$  に含まれる

### gap labeling theorem

自己相似格子のエネルギースペクトルが一般に **multifractal** 構造となる原因について考察する. 自己相似格子の構造因子が Bragg peak だけから成ることは, 電子に対するポテンシャル  $V_j$  が次のようなフーリエ展開を持つことを意味している:

$$V_j = \sum_{\kappa \in \mathcal{M}} A_{\kappa} \exp(2i\pi\kappa j). \quad (64)$$

従って, 自由電子モデル (周期系) から出発し, 上記ポテンシャルを摂動論的に扱えば, 電子の有理化波数  $k$  が  $\kappa/2$  ( $\kappa \in \mathcal{M}$ ) と一致するような電子のエネルギーのところにバンドギャップが開くことになる. 波数  $k$  はブリルアンゾーン  $[-1/2, 1/2]$  に含まれる. ところが, Fourier module  $\mathcal{M}$  はこのブリルアンゾーンの中で密な集合であるから, 至る所に

<sup>27</sup>ヤコビ行列とは  $T^p$  をその固定点付近での線形近似したときの変換行列である.



バンドギャップが開くことになる。2個の状態  $\pm k$  はエネルギー的に縮退しているから、バンドギャップが開くエネルギーにおける周期系の積分状態密度  $H(E)$  の値は  $2k = \kappa$  となる。従って、次の定理が摂動論的に「証明」された：

gap labeling theorem[28]：

$G_\sigma$  は区間  $[0, 1]$  に含まれる逆格子ベクトルとなる。つまり、 $G_\sigma = \mathcal{M}_{[0,1]}$ 。

実は、上記「証明」は数学的には正しくない。次の和が発散するからである：

$$\sum_{\kappa \in \mathcal{M}} |A_\kappa|. \quad (65)$$

$\kappa$  により指定されるバンドギャップの幅を摂動論的に計算すると  $2|A_\kappa|$  となるが、バンドギャップの総和が発散することは物理的にはあり得ない。他方、もしも上記の総和が収束するならば、バンドギャップの総和も収束する。従って、ポテンシャルが十分弱ければ、バンドギャップの総和も十分小さな値となる。この場合、バンドギャップを除いてもエネルギースペクトルは有限の長さ（数学的には測度）を持つことになる。このようなエネルギースペクトルは絶対連続（absolutely continuous）と呼ばれる。このことは Harper model<sup>28</sup> と呼ばれる1次元準周期系で実現される。この場合と比較すれば、自己相似格子のエネルギースペクトルが絶対連続とはならないことが理解できる。

## 臨界状態

臨界状態（critical state）というのは、広がった状態と指数関数的に減衰する局在状態の中間的状态で、べき的に減衰する状態である。後の議論のために、波動関数の局在性を次のように定義する<sup>29</sup>。

$$X(L) \equiv \sum_{j=-L}^L |\phi_j|^2 \sim L^\gamma \quad (L \rightarrow \infty) \quad (66)$$

$$\begin{cases} \gamma = 0 & \dots \text{局在状態} \\ 0 < \gamma < 1 & \dots \text{臨界状態} \\ \gamma = 1 & \dots \text{広がった状態} \end{cases}$$

エネルギースペクトルの局所的自己相似性中心となるエネルギーにおける波動関数は自己相似性をもつ（図5, 6参照）。

## 4.6 可逆的自己相似格子の代表：Fibonacci 格子

可逆的自己相似格子の電子状態については、Kohmotoらの先駆的研究に引き続く研究によって詳しく調べられている[3]。ここでは、その代表であるFibonacci格子の場合に

<sup>28</sup>ポテンシャルが sinusoidal すなわち、 $V_j = 2A \cos(2\pi\kappa j + \delta)$  と表せる場合[3]。

<sup>29</sup>後に、 $\gamma = 0$  となる臨界状態（marginal critical state）が存在することを示す。

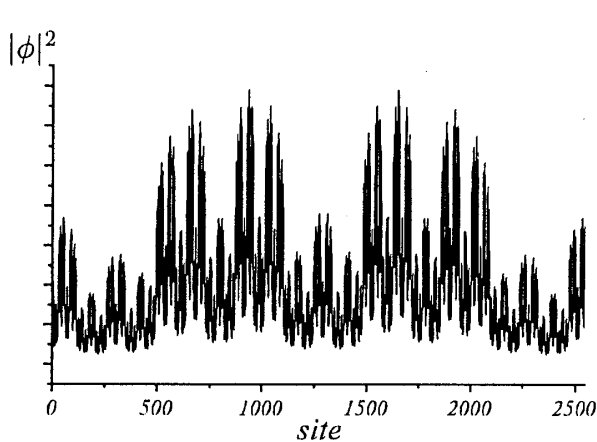


図 5: 図 4 の  $H(E) = 0$  の状態に対応する波動関数

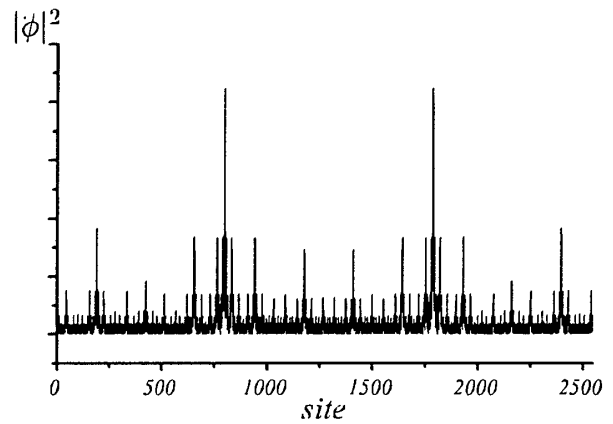


図 6: 図 4 の  $H(E) = 1/2$  の状態に対応する波動関数. きれいな自己相似構造であることがわかる.

ついで紹介する. Fibonacci 格子の trace map は式 (57) として与えられているから,

$$\begin{cases} x_{n+1} = y_n \\ y_{n+1} = z_n \\ z_{n+1} = 2y_n z_n - x_n \end{cases} \quad (67)$$

となる. Fibonacci 格子の場合, エネルギースペクトル, 波動関数および trace map は次のような性質を持つ.

1. trace map の cycle 全体の集合は  $\sigma_{\text{ls}}$  と一致する.
2.  $\sigma_{\text{ls}}$  は  $\sigma$  上で密に分布する. また,  $\sigma_G$  は  $\sigma_{\text{ls}}$  に含まれる.
3.  $\mathbf{Q}[\omega] \equiv \{x + y\omega \mid x, y \in \mathbf{Q}\}$  とすれば,  $S = \mathbf{Q}_{[0,1]}[\omega]$  となる<sup>30</sup>.
4.  $f(\alpha)$ -spectrum, 従って,  $\alpha_{\min}, \alpha_{\max}$  は  $\Delta$  に依存する. また, 不等式  $0 < \alpha_{\min} < \alpha_{\max} < 1$  を満たす.
5. 前項により, すべての波動関数はべき的減衰を示す.
6.  $\sigma_{\text{ls}}$  に属する波動関数は漸近的自己相似性を持つのに対して, それ以外の波動関数はカオス的である.
7.  $p$ -cycle の固定点における線形解析の際に登場する固有値  $\lambda_{\max}$  の値が不変量の値, 従って,  $\Delta$  に依存する.
8. 同じ線形解析の際に登場する第 2 固有値  $\lambda_{\min}$  は関係式  $|\lambda_{\max} \lambda_{\min}| = 1$  を満たすので, その絶対値は 1 より小さい. そのため, trace map の安定多様体に沿った流れが指数関数的に固定点に収束する.

上記の性質 3 が成り立つことは P.A.Kalugin らが証明した [27].  $\mathbf{Q}_{[0,1]}[\tau_G]$  に属する数  $x$  は,  $\tau_G$ -進展開 (付録 2 次体の数論を参照) を行ったときに, 始めの有限ステップを除いて循環する. 図 4 で (b) の部分は  $H(E) = \frac{1}{2} = 0.\overline{100}_{\tau_G}$  となるエネルギー準位であり, 局

<sup>30</sup>一般的に書き表したが, Fibonacci 格子の場合  $\omega = \tau_G$  となる.

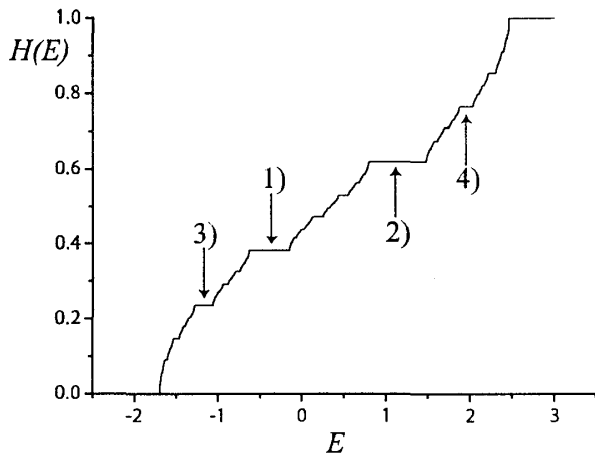


図 7: Fibonacci 格子の積分状態密度  $H(E)$ . 各バンドギャップ内では  $H(E) = \text{const.}$  となる.

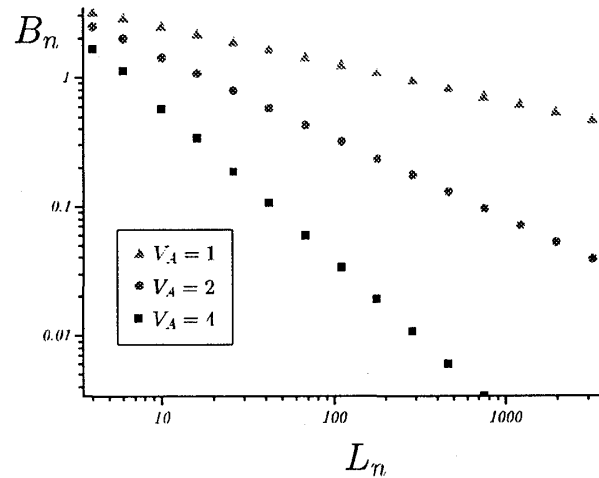


図 8: バンド幅  $B$  とサイズ  $L_n$  の関係

所的自己相似性の中心となっている. また  $\sigma_g$  は  $\sigma_{ls}$  に含まれているので, 図 4 の (a) の部分である  $H(E) = 0$  も局所的自己相似性の中心である.

上記の性質 4 は, trace map の軌道が乗る曲面が  $\Delta$  に依るためである. また, 上記の性質 6 に関しては図 5, 6 参照.

以上の性質は, Fibonacci 格子に限らず可逆的自己相似格子の一般的性質であることが知られている. これらの性質および前節で議論したことについて, 以下ではさらに詳しく調べてみる.

### (1) gap labeling theorem について

gap labeling theorem がどのように成り立っているかを, Fibonacci 格子の積分状態密度  $H(E)$  について見てみる. 図 7 で水平部分がバンドギャップを表している. 1) ~ 4) で指し示しているステップの高さが集合  $M_{[0,1]}$  に属することを具体的に確かめてみる. Fibonacci 格子の場合, 随伴行列の固有値  $\tau$  は黄金比  $\tau_G \equiv (1 + \sqrt{5})/2$  となる. この場合  $\omega = \tau_G$  となり,  $\tau_G$  は unit でもある. また,  $1 + \omega = 1 + \tau_G = \tau_G^2$  も unit になるので,  $M = \mathbf{Z}[\tau_G]$  が成り立つ. 従って,  $G_\sigma = \mathbf{Q}_{[0,1]}[\tau_G] = \{m + n\tau_G \mid m, n \in \mathbf{Z}, 0 \leq m + n\tau_G \leq 1\}$  となる. 図 7 で番号 1) ~ 4) によって指し示しているステップの高さは次のように与えられる:

$$\begin{cases} 1) \cdots (n, m) = (2, -1) \rightarrow H(E) = (3 - \sqrt{5})/2 = 0.381966 \cdots \\ 2) \cdots (n, m) = (-1, 1) \rightarrow H(E) = (\sqrt{5} - 1)/2 = 0.618033 \cdots \\ 3) \cdots (n, m) = (-3, 2) \rightarrow H(E) = \sqrt{5} - 2 = 0.236067 \cdots \\ 4) \cdots (n, m) = (4, -2) \rightarrow H(E) = 3 - \sqrt{5} = 0.763932 \cdots \end{cases} \quad (68)$$

### (2) エネルギースペクトルの fractal 性について

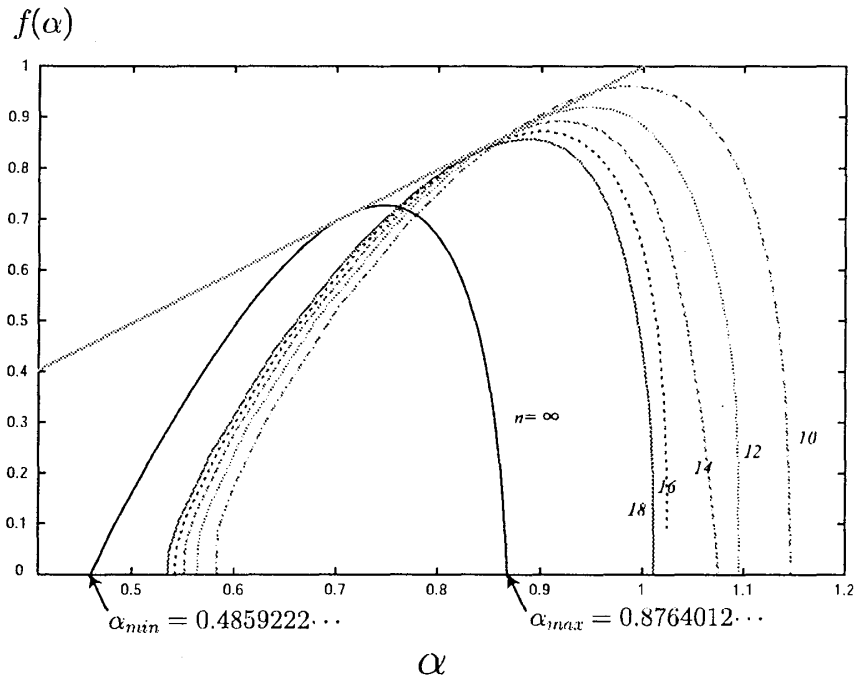


図 9: Fibonacci 格子の  $f(\alpha)$ -spectrum

図8は、第  $n$  世代の近似格子の  $L_n$  個のエネルギーバンドのバンド幅  $B_n^{(i)}$ ,  $i = 1, 2, \dots, L_n$  をたし合わせた合計

$$B_n \equiv \sum_{i=1}^{L_n} B_n^{(i)} \quad (69)$$

と  $L_n$  の間の関係をプロットしたものである。エネルギースペクトルが fractal であるために、べき乗関係  $B_n \sim (L_n)^{-\beta}$  ( $\beta > 0$ ) が成り立つ。

### (3) 局所次元 $\alpha$ について

trace map (67) の場合について、 $T^p$  ( $p \in \mathbb{N}$ ) の固定点がいくつか求められている [25],[2].  $p = 1$  のときは、 $\Delta = 0$  (周期系) の場合の固定点になっているので考えない。  $p = 2$  の場合の  $\mathbf{r}_n$  を求めると：

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 = (a, b, a) &\iff \mathbf{r}_2 = (b, a, b), \\ a = I' + \sqrt{I'^2 - I'} &, \quad b = I' - \sqrt{I'^2 - I'}. \end{aligned} \quad (70)$$

ただし、 $I' = (3 + \sqrt{25 + 16I})/8$  とした。固定点におけるヤコビ行列の2つの固有値<sup>31</sup>は、

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{2} \left[ 8I' - 1 + \sqrt{(8I' - 1)^2 - 4} \right], \quad (71)$$

$$\lambda_{\min} = \frac{1}{\lambda_{\max}} \quad (72)$$

<sup>31</sup>実際には3次元写像であるので、固有値は3個ある。しかし、実質的には曲面上のみ動くために、第3の固有値は必ず  $\lambda = 1$  となる。

となる.  $\lambda = |\lambda_{\max}|$  と  $\mu = \tau_G^2$  を式 (63) に代入すると, 局所次元  $\alpha$  は,

$$\alpha = \frac{\ln \tau_G^2}{\ln |\lambda_{\max}|} \quad (73)$$

と決まる. バンドエッジ全体の集合  $\sigma_G$  に属するエネルギー  $E$  を初期値とする trace map は, すべてこの 2 周期固定点に落ちる. さらにこの 2 周期に対応する局所次元は, 局所次元のうちの最小値  $\alpha_{\min}$  を与えることが知られている. 式 (73) は  $\Delta$  に依存するから,  $\alpha_{\min}$  も  $\Delta$  に依存する. 特に  $\Delta = 1$  とすると  $I = 1/4$  となり, 従って  $\alpha = 0.485922\dots$  となる.

次に示すのは trace map の 6 周期である:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 = (0, 0, c) &\Rightarrow \mathbf{r}_2 = (0, c, 0) \Rightarrow \mathbf{r}_3 = (c, 0, 0) \Rightarrow \\ \mathbf{r}_4 = (0, 0, -c) &\Rightarrow \mathbf{r}_5 = (0, -c, 0) \Rightarrow \mathbf{r}_6 = (-c, 0, 0) \Rightarrow . \end{aligned}$$

ただし,  $c = \sqrt{1+I}$  とした. 6 周期に対応するヤコビ行列の 2 つの固有値は次のように求まる:

$$\lambda_{\max} = \left[ \sqrt{1 + 4(1+I)^2} + 2(1+I) \right]^2, \quad (74)$$

$$\lambda_{\min} = \frac{1}{\lambda_{\max}}. \quad (75)$$

局所次元  $\alpha$  は,

$$\alpha = \frac{\ln \tau_G^6}{\ln |\lambda_{\max}|} \quad (76)$$

と求められる. この  $\alpha$  は  $\alpha_{\max}$  を与える.  $\alpha_{\max}$  も  $\Delta$  に依存する. 特に  $\Delta = 1$  の場合には,  $\alpha = 0.876401\dots$  となる.

Fibonacci 格子の場合の  $f(\alpha)$ -spectrum は図 9 のようになる.  $\alpha_{\min}$  や  $\alpha_{\max}$  がポテンシャルの強さ  $\Delta$  に依存するから,  $f(\alpha)$ -spectrum も  $\Delta$  に依存する. Fibonacci 格子の trace map が不変量  $I(x, y, z)$  を持ち, しかもこの不変量の値が  $\Delta$  に依存するからである. このように, Fibonacci 格子のエネルギースペクトルの multifractal 性を特徴付ける  $f(\alpha)$ -spectrum は普遍性を示さない [2].

## 4.7 非可逆的自己相似格子の代表: PD 格子

### PD 格子の trace map

PD 格子の生成規則は  $A \rightarrow BB, B \rightarrow AB$  である. この生成規則はカオス理論に由来する [29]. PD 格子の transfer matrix に対する漸化式は次のようになる:

$$\begin{cases} T_A^{(n+1)} = T_B^{(n)} T_B^{(n)} \\ T_B^{(n+1)} = T_A^{(n)} T_B^{(n)} \end{cases} \quad (T_A^{(0)} = T_A, \quad T_B^{(0)} = T_B). \quad (77)$$

従って、その trace map は次のようになる [7] :

$$\begin{cases} x_{n+1} = 2y_n^2 - 1 \\ y_{n+1} = z_n \\ z_{n+1} = 2y_n(2z_n y_n - x_n) - z_n \end{cases}$$

この写像が非保存的であることは、そのヤコビアン $T$ の絶対値が1とならないことでわかる。PD 格子は非可逆的自己相似格子であるから、式 (50) は不変量とはならない。非可逆的自己相似格子の場合、一般には不変量を持たないが、PD 格子を含むある特殊な系列の場合に限り、式 (50) とは異なった不変量を持つ [30],[20],[11]。PD 格子の不変量は式 (48) で与えられる。なぜなら、この格子に対して関係式  $\text{Tr}[T_B^{(n+1)}(T_A^{(n+1)})^{-1}] = \text{Tr}[T_A^{(n)}(T_B^{(n)})^{-1}]$  が成り立つからである。この不変量の値を求めるには  $n = 0$  の場合について計算すればよい。驚くべきことに、その値は 1 となり、 $E, V_A, V_B$  には一切依らない。この点は、可逆的自己相似格子のときの不変量 (50) の場合と対照的である。この違いが、電子状態に決定的な違いをもたらすことが後の議論で明らかになる。なお、PD 格子と MLD の関係にある Copper-Mean 格子も PD 格子と類似の不変量を持つが、この不変量の値は  $E, V_A, V_B$  依存することが知られている [31]。

不変量の存在により、PD 格子の trace map は曲面  $J(x, y, z) \equiv 2xy - z = 1$  上に制限された 2次元写像となる。この曲面は方程式  $z = 2xy - 1$  として表せるので、この 2次元写像は  $xy$ -平面上の写像となる。具体的には次式で与えられる [30] :

$$\begin{cases} x_{n+1} = 2y_n^2 - 1 \\ y_{n+1} = 2x_n y_n - 1 \end{cases} \quad (78)$$

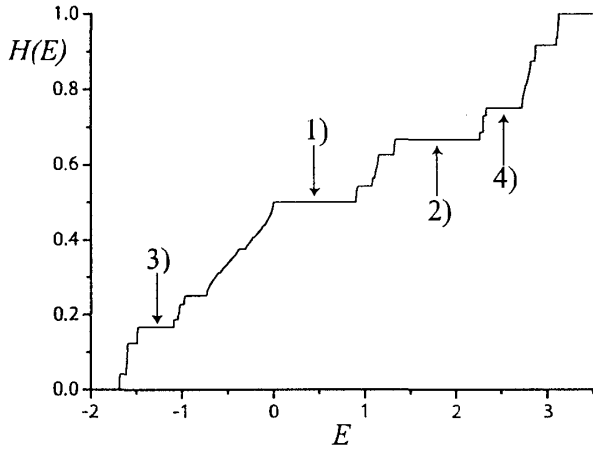
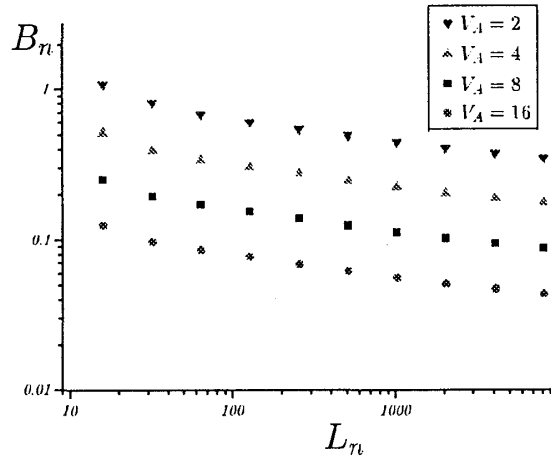
この 2次元写像が非保存的であることは、そのヤコビアンを計算することにより容易にわかる。この写像は 2 : 1 の写像であり、その逆写像は 2 価となる。

## 2 進展開

PD 格子の随伴行列の固有値は  $\tau, \tau' = 2, -1$  (整数) となる。すなわち、自己相似格子の構造因子  $S(Q)$  が Bragg peak だけからなる **limit periodic system** に分類される。PD 格子のエネルギースペクトルのギャップの集合は gap labelling theorem により、 $G_\sigma = \mathcal{M}_{[0,1]} = \mathbf{Z}_{[0,1]} \{2\}$  となる (式 (34))。すなわち、積分状態密度のステップの高さは分母が 2 のべきとなるような有理数によって指定される。図 10 で 1) ~ 4) で指し示しているステップの高さの場合に具体的に示すと次のようになる :

$$H(E) = \begin{cases} 1) \dots \frac{1}{2} \\ 2) \dots \frac{5}{8} \\ 3) \dots \frac{1}{4} \\ 4) \dots \frac{3}{4} \end{cases}$$

図 11 は図 8 と同様にバンド幅の合計  $B_n$  をサイズ  $L_n (= 2^n)$  に対してプロットしたものであるが、サイズ  $L_n$  に関してべき的に減少する Fibonacci 格子のとは違い、減少幅がサイ


 図 10: PD 格子の  $H(E) = 0$  の状態

 図 11: PD 格子の  $H(E) = \frac{1}{2}$  の状態

ズ増加に伴って小さくなっている。また、Fibonacci 格子のとは違い、ポテンシャルを変えても、 $B_n$  と  $L_n$  との関係（両対数プロット）が単に平行移動するだけに見える。これら 2つの原因は後の議論で明らかにする。

### trace map の軌道の振る舞い

trace map (78) を  $T$  としたときに、 $T$  の性質は  $T^p$  ( $p = 1, 2, 3, \dots$ ) の固定点の振る舞いにより支配される。 $T$  はパラメタ  $V_A, V_B, E$  のどれも含まないので、これらの固定点は周期系 ( $V_A = V_B = 0$ ) の場合の固定点でもある。

**周期系 ( $V_A = V_B = 0$ ) の軌道** 波数  $\kappa$  で指定される周期系のエネルギー  $E = -2 \cos 2\pi\kappa$  の場合の trace map の軌道  $\{(x_n(E), y_n(E))\}$  は次のようになる（式 (62) 参照）：

$$x_n = y_n = \cos(2\pi\kappa L_n), \quad L_n = 2^n. \quad (79)$$

正弦 ( $\cos$ ) は偶関数であるから、 $0 \leq \kappa \leq 1/2$  と仮定することができる。 $\kappa$  は実数値平面波（正弦波）の節の数を 1 サイトあたりに規格化したものである。周期系の積分状態密度  $H(E)$  が有理化波数  $\kappa = \kappa(E)$  と関係式  $H(E) = 2\kappa(E)$  により結ばれることは gap labelling theorem のところで注意したが、このことは次のような直接計算によっても示すことができる。周期系のエネルギー  $E = -2 \cos 2\pi\kappa$  の場合、状態密度と積分状態密度が

$$D(E) = \frac{1}{\pi\sqrt{4-E^2}} \quad (|E| \leq 2), \quad (80)$$

$$H(E) = \int_{-\infty}^E D(E') dE' = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}\left(-\frac{E}{2}\right) \quad (81)$$

となるからである。従って、軌道  $\{(x_n(E), y_n(E))\}$  の漸近的振る舞いは積分状態密度  $H(E)$  により決定されることになる。この場合、 $x_n = y_n = \cos 2\pi\theta_n$ ,  $\theta_n = 2^n\kappa$  となるから、軌道  $\{(x_n, y_n)\}$  の振る舞いは数列  $\{\theta_n \bmod 1\}$  の振る舞いにより決定される：

- $H(E) \in \mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$  (2進展開が有限桁で終わるとき)  $\rightarrow$  軌道  $\{(x_n, y_n)\}$  は有限ステップの後に固定点  $(1, 1)$  に落ちる.
- $H(E) \in \mathbf{Q}'_{[0,1]}\{2\}$  (2進展開が途中から循環する)  $\rightarrow \{(x_n, y_n)\}$  は有限ステップの後にサイクルに落ちる<sup>32</sup>.
- 一般の  $\kappa \rightarrow$  軌道  $\{(x_n, y_n)\}$  はカオス的となる.

$\kappa \in \mathbf{Q}'[2]$  の場合, それは適当な奇数  $d$  を用いて,  $\kappa = a/d, a \in \mathbf{Z}\{2\}$  と表すことができる. このとき, 軌道  $\{(x_n, y_n)\}$  のサイクルの周期  $p$  は  $\kappa(2^p \mp 1) \equiv 0 \pmod{1}$  を満たす最小の自然数として決定される<sup>33</sup>. このことは,  $p$  が  $2^p \mp 1$  が  $d$  で割り切れる最小の自然数と言うことと同じである. 従って, 1-cycle は  $d = 3$  のときのみ, すなわち,  $\kappa = 1/3$  である場合である. 2-cycle は  $d = 5$  のときのみで, 3-cycle は  $d = 7$  と  $d = 9$  の2つのケースがある. 例えば,  $d = 9$  の 3-cycle は  $\theta$  の値の3つ組  $(1/9, 2/9, 4/9)$  で特徴づけられる.

ここで注意しなければならないのは, 前段で議論したグループ以外にもうひとつ 1-cycle に落ちるグループがあるということである. このグループは  $\kappa$  が  $\mathbf{Z}\{2\}$  に属する場合で, その固定点は  $(1, 1)$  である. その固定点に向かう初期値を決める電子のエネルギーはバンドエッジとなる.

以上, 周期系のエネルギーを  $E = -2 \cos 2\pi\kappa$  とした場合の  $\kappa$  の値によって, 軌道  $\{(x_n(E), y_n(E))\}$  の漸近的振る舞いが決まることを見てきた.

**非周期系 ( $V_A \neq V_B$ ) への拡張** 非周期系 ( $V_A \neq V_B$ ) の場合に上記の結果がどのように変更されるかについて調べる. 周期系の場合でカオス的でない場合には, 軌道  $\{(x_n, y_n)\}$  は途中で完全なサイクルに落ちる. 非周期系の場合, 一般にはこのようなことは期待できず, サイクルに落ちるとしても  $n \rightarrow \infty$  の極限においてのみとなる. ここで注意すべきは, PD 格子の trace map のサイクルは上で分類したもの以外には存在しないことである. なぜなら, PD 格子の場合のサイクルは必ず周期系のサイクルとなるからである. いずれにせよ, PD 格子の trace map がサイクルに落ちた場合, それは 周期系と同じ になる. 従って, サイクルに対応するエネルギー  $E$  の局所次元  $\alpha = \alpha(E)$  は 1 となるはずである. ただし,  $E$  がバンド端の場合には,  $\alpha = 1/2$  となる. PD 格子のすべてのサイクルの局所次元が 1 となることについては, 次節で検証する.

ここで,  $\Delta \equiv V_A - V_B$  を断熱的にゼロから有限値に変化させた場合を考える. 周期系の各準位は 2 重縮退している<sup>34</sup>が, 対称中心に関するパリティで区別すれば, 縮退はない. PD 格子は鏡映対称性を持つので, その対称中心に関するパリティを考えれば, 各

<sup>32</sup>非保存的な非線形力学系における極限サイクル (limit cycle) のこと.

<sup>33</sup> $\kappa(2^p + 1) \equiv 0 \pmod{1}$  の場合,  $\theta_{n+p} = -\theta_n \pmod{1}$  となるが, 正弦 ( $\cos$ ) は偶関数であるから, 軌道  $\{(x_n, y_n)\}$  の周期は  $p$  となる.

<sup>34</sup> $\kappa = 0$  と  $\kappa = 1/2$  の2つの場合は除く,



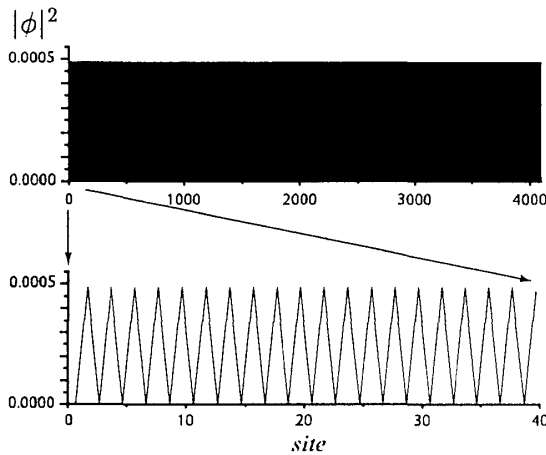


図 12: 完全周期的波動関数

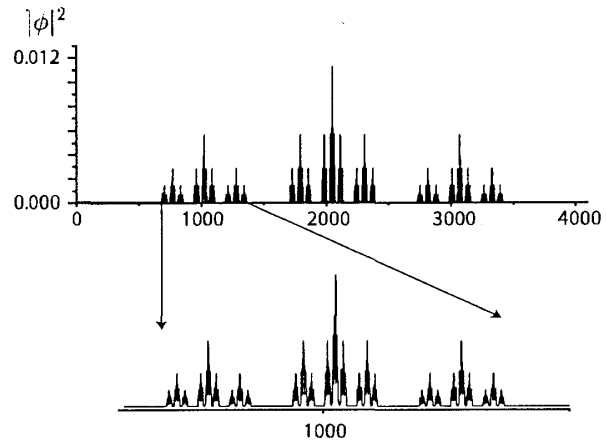


図 13: marginal critical state

エネルギー準位は連続的に変化する. また,  $\kappa$  は  $\Delta \neq 0$  となっても 1 サイト当たりの節の数としての意味を保持し, 従って, 有効波数と呼ぶことができる. この場合, 軌道  $\{(x_n(E), y_n(E))\}$  の漸近的振る舞いは, 積分状態密度  $H = H(E)$  により決定されることになる. しかもその規則は, 周期系について上に述べたものと同じになる.

以上のことから, PD 格子に対する gap labelling theorem は次のように表される:

- $G_\sigma \equiv \{H(E) \mid E \in \sigma_G\} = \mathbf{Z}_{[0,1]}[2]$ .

また, 可逆的自己相似格子の一電子状態の一般的性質としてあげた 8 個の性質のうち, 次の性質は PD 格子に対してでもそのまま成り立つ:

- $S \equiv \{H(E) \mid E \in \sigma_{1s}\} = \mathbf{Q}'_{[0,1]}[2]$ .

ここで重要なことは,  $H \in G_\sigma$  の場合, 対応するエネルギーがギャップを挟んで 2 個  $E_+$ ,  $E_-$  ( $E_+ \neq E_-$ ) 存在することである. PD 格子の場合には  $P(x_n, y_n, z_n) = 2y_n$  となるが, この格子特有の性質から  $y_n(E) = 0$  を満たすエネルギーはすべて  $E \in \sigma_G$  を満たしている. そのため, PD 格子では 2 個のエネルギー  $E_+$ ,  $E_-$  の一方は  $\alpha(E) = 1/2$  に対応する広がった状態となる. この広がった状態は**完全周期的波動関数** (図 12) である [23]. 驚くべきことに, もう一方は  $\alpha(E) = 0$  に対応する **marginal critical state** であることが判明した. ここで, marginal critical state とは, 図 13 に示したように, 振幅が stretched exponential で減少する, 極めて局在状態に近い臨界状態である [32],[33]. このことは, 参考文献 [32] と同様な実空間くりこみ群の手法により解析的に証明することができる. marginal critical state のエネルギー固有値はエネルギースペクトルの局所的自己相似性の中心とはならず, 特異な scaling を示す. この状態についてのこれ以上の詳しい解析は, 本稿では割愛させていただく. なお, marginal critical state は 3 元保存系の場合の一電子状態の研究によって発見された [32].

この問題を除けば, 可逆的自己相似格子の一電子状態の一般的性質の第 2 項目

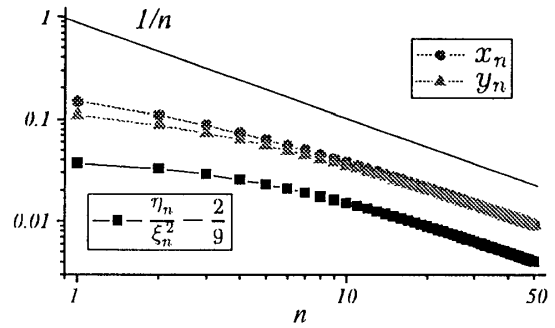
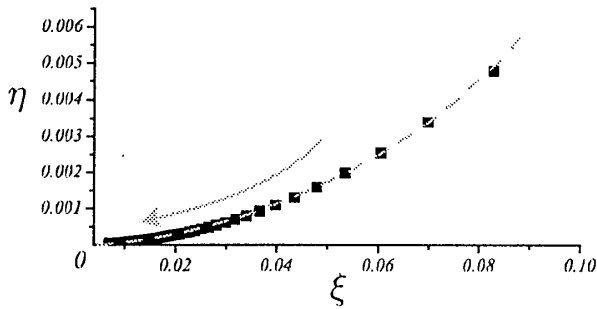


図 14: PD 格子の trace map の固定点  $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$  への近づきかた 1  
 図 15: PD 格子の trace map の固定点  $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$  への近づきかた 2

- $\sigma_{ls}$  は  $\sigma$  上で密に分布し, また,  $\sigma_G$  は  $\sigma_{ls}$  に含まれる.

も成り立つ. また,  $\alpha_{\min} = 0, \alpha_{\max} = 1$  となるから, 可逆的自己相似格子の一電子状態の一般的性質の第 4 項目, 「すべての波動関数はべき的減衰を示す。」は成り立たない.

### 4.8 PD 格子の trace map の解析

PD 格子のすべてのサイクルに対して  $\alpha = 1$  となることを以下で検証する. この場合,  $\tau = 2$  となるので, 1-cycle は有理化波数  $\kappa$  が  $\frac{1}{3}\mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$  に属する場合と,  $\kappa \in \mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$  (2 進展開が有限桁で表される時) の 2 通り存在する.  $\kappa = \frac{1}{3}$  の場合,  $\cos(2\pi\kappa \times 2^n) = -\frac{1}{2}$  となるから, 前者の固定点は  $(x, y) = (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$  となる. 他方,  $\kappa \in \mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$  ならば,  $n$  を十分大きくとれば  $\kappa \times 2^n$  は整数となるから, trace map の対応する固定点は  $(1, 1)$  となる. これら 2 つの点実際に PD 格子の trace map (78) の固定点であることは容易に確かめることができる. trace map のこれら 2 つの固定点近傍における線形解析から対応するエネルギースペクトルの局所次元  $\alpha$  を求めると, それぞれ, 1 および  $\frac{1}{2}$  となり, 一般的議論の結果と完全に一致する.

ここで, trace map の固定点  $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$  への近づき方を調べる. 固定点におけるヤコビ行列の固有値は  $\lambda = -2, 1$  となり,  $|\lambda_{\min}| < 1$  の条件を満たさない. 従って, 可逆的自己相似格子のときのように固定点へ指数関数的には近づかない.  $\lambda = 1$  が marginal な固有値であるため, 線形近似の範囲ではこの固定点に近づくのか否かは結論を出せない. 固定点への近づきかたを調べるために, 座標原点を固定点に移すような線形変換 ( $x = -\frac{1}{2} \rightarrow \xi + \eta, y = -\frac{1}{2} \rightarrow \xi - 2\eta$ ) を行うと次の写像が得られる:

$$\begin{cases} \xi_{n+1} = \xi_n + \frac{2}{3}(\eta_n - \xi_n)\xi_n \\ \eta_{n+1} = -2\eta_n + \frac{2}{3}(\xi_n^2 - \eta_n^2) \end{cases} \quad (82)$$

この写像の固定点  $(\xi, \eta) = (0, 0)$  への近づきかたは, 図 14 により固定点付近では 2 次関数的 ( $\eta_n \approx C\xi_n^2$ ) であることがわかる. 従ってこの関係式を仮定し, 式 (82) に代入し,  $\xi$

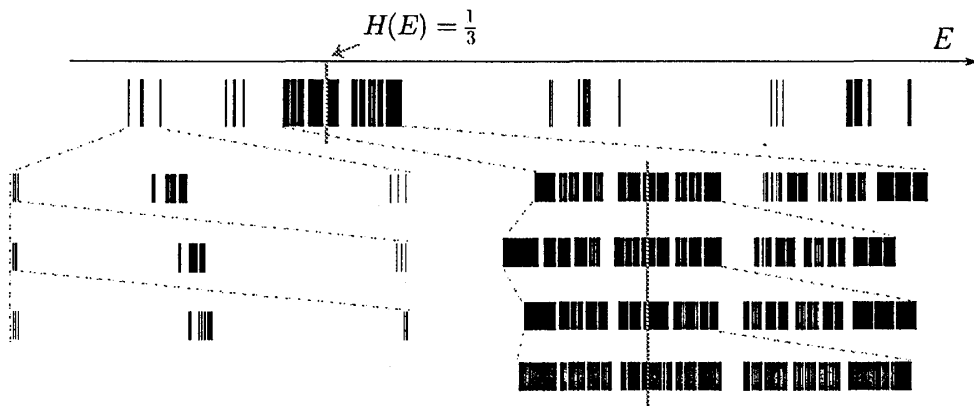


図 16: PD 格子のエネルギースペクトル.  $H(E) = 1/3$  の場合, エネルギースペクトルは 1 階拡大するごとに反転する. しかし図は, すべて向きをそろえて描いた. 反転する理由はヤコビ行列の固有値の  $\lambda_{\max}$  が負であるためである.

の最低次のみを考えると  $C = 2/9$  と求まる.  $\eta_n \simeq \frac{2}{9}\xi_n^2$  が固定点付近では妥当であることは, 比  $\eta_n/\xi_n^2$  が  $n$  と共に  $2/9$  に近づくことからわかる (図 15). しかも, この近づきかたは関数  $1/n$  として表される. この関係から, 原点を移動した  $x_n + 1/2$  と  $y_n + 1/2$  も  $1/n$  で  $(0, 0)$  に近づくことが分かる (図 15). このように,  $\alpha = 1$  に対応する固定点への収束の仕方は, 指数関数的に収束する可逆的自己相似格子の場合とはまったく違い, 極めて遅いことがわかった. このことが電子状態にどのような影響があるのかを次に考える.

## 4.9 特異な電子状態

### エネルギースペクトル

図 16 の 1 段目は PD 格子のエネルギースペクトルである. 2 段目以降は, 基底状態  $H(E) = 0$  (左) と  $H(E) = \frac{1}{3}$  (右) の状態を中心に拡大していったものを表す. 基底状態  $H(E) = 0$  の部分は, 本稿ではその議論を割愛した  $\alpha = 0$  であるエネルギースペクトルに相当し, 対応する波動関数は図 13 に示した marginal critical state である. スペクトルを拡大していくに従ってギャップの幅が広がっていき, スペクトルは次第にやせ細っていく. 一方,  $H(E) = \frac{1}{3}$  の場所は  $\alpha = 1$  の局所対称中心に相当している. 一見自己相似構造があるように見えるが, エネルギーギャップの幅が次第に狭くなっていくことがわかる. 拡大を繰り返してゆけばスペクトルは連続スペクトルに収束するであろう. これが, 図 10 の  $B_n$  と  $L_n$  との関係 (両対数プロット) の減少傾向が次第に小さくなることの原因である. 対応する波動関数は次に示す.

以上により, PD 格子の  $f(\alpha)$ -spectrum の場合, 可逆的自己相似格子のそれとは異なり,  $\alpha$  が 0 から 1 まで分布することが明らかになった. 図 17 に PD 格子の  $f(\alpha)$ -spectrum を示す. 図の 6 ~ 11 は第 6 ~ 11 世代の近似格子に対する数値計算の結果であり, 実線は

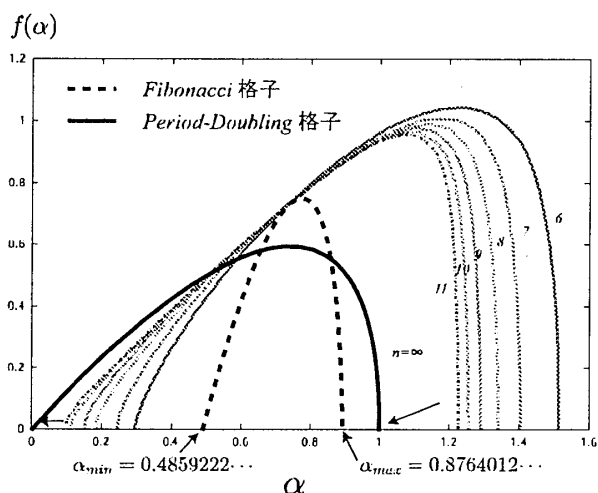


図 17:  $f(\alpha)$ -spectrum

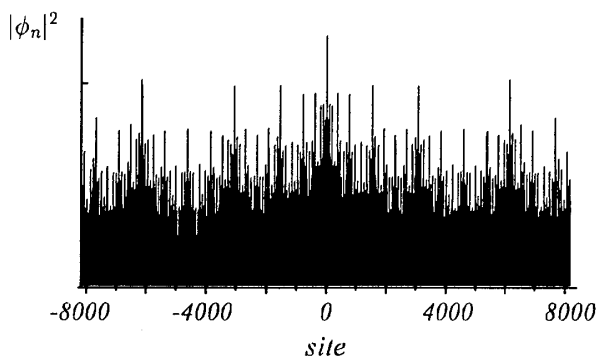


図 18:  $\kappa \in \mathbb{Q}'_{[0,1]}[2]$  に対応する波動関数

無限系での振る舞いを予想した曲線である。PD 格子の trace map がポテンシャルに依らないために  $f(\alpha)$ -spectrum は普遍的 (universal) である。

### 波動関数

$H(E)$  が  $S = \mathbb{Q}'_{[0,1]}[2]$  に属するようなエネルギー  $E$  を初期点とする trace map は  $n \rightarrow \infty$  の極限でサイクルに収束する。しかもその固定点は周期的な場合のそれと同じであるために、エネルギースペクトルの局所次元  $\alpha$  は必ず 1 となる。周期系と同じ固定点に収束するのであれば、対応する波動関数も周期系の場合と同じ広がった状態ではないかと考えられるであろう。果たして、今までに知られている臨界状態なのか、それとも広がった状態なのか非常に興味がある。

PD 格子の  $\kappa \in \mathbb{Q}'_{[0,1]}[2]$  となるエネルギーに対応する波動関数は図 18 のようになる。広がった状態と臨界状態の違いは、式 (66) で定義される  $\gamma$  の値によって調べられる。この状態は、臨界状態よりもゆっくり減衰する  $X(L)/L \sim (\log L)^{-\delta}$  のような振る舞いをすることが予想されるが、数値的には確かめられていない。可逆的自己相似格子の場合、臨界状態に対応する固定点への trace map の収束は指数関数的であるのだが、非可逆的自己相似格子の場合のそれは非常に遅く ( $\sim 1/n$ )、有限系での数値計算で確かめることが難しいことが原因であると考えられる。

いずれにせよ、固定点付近での振る舞いが今まで知られている臨界状態とは異なっているために、新しい臨界状態である可能性がある。

#### 4.10 Pisot 非可逆的自己相似格子の電子状態

これまでの議論から明らかなように、可逆的自己相似格子の trace map が universality を持たないのは、それが不変量  $I(x, y, z)$  を持ち、しかもその不変量の値が  $\Delta$  に依存するからである。他方、PD 格子は別の不変量  $J(x, y, z)$  を持つが、この不変量  $J(x, y, z)$  は、たまたま  $E$  や  $\Delta$  には依らない。PD 格子の trace map の性質が universal となったのはそのためである。これに対して、PD 格子と同種の不変量を持つ Copper-Mean 格子の場合、その不変量の値が  $E$  と  $\Delta$  に依存している<sup>35</sup>。この場合、可逆的自己相似格子の場合と同様 trace map の universality は破れる。

ところで、一般の Pisot 非可逆的自己相似格子の trace map は、非保存的でかつ不変量を持たない。従って、trace map により生成される軌道の初期条件が  $E$  と  $\Delta$  に依存するのにも拘わらず、写像を繰り返すたびにその情報の多くが失われ、universal な attractor に吸収されることになる。この attractor が図 3 に示された曲面に他ならない。このことは式 (60) の後の議論からも理解することができる。従って、一般の Pisot 非可逆的自己相似格子の trace map も universal である。また、式 (60) の後で述べたように、周期系 ( $\Delta = 0$ ) trace map の軌道はこの attractor 上に制限される。ここで注意すべきは、写像の非保存性に起因する情報消失は全面的ではないことである。極限サイクル (limit cycle) に落ちる場合があるからである。明らかに、周期系の trace map の軌道のサイクルは非周期系 ( $\Delta \neq 0$ ) の trace map の軌道のサイクルでもある。このように、一般の Pisot 非可逆的自己相似格子の trace map は PD 格子の trace map といくつかの点で共通性を持つ。そのため、サイクルに対応するエネルギースペクトルの局所次元  $\alpha$  は 1 となる。以上により、PD 格子で発見された事実は、わずかに修正するだけで一般の Pisot 非可逆的自己相似格子にも適用ができることが分かる [34]。特に、Pisot 非可逆的自己相似格子の  $f(\alpha)$ -spectrum は universal で  $\alpha$  の分布は区間  $[0, 1]$  全体に広がっている。 $\alpha_{\min} = 0$ ,  $\alpha_{\max} = 1$  となることは、 $f(\alpha)$ -spectrum が universal であること整合的である。なぜなら、universal な場合、 $\alpha_{\min}$  や  $\alpha_{\max}$  の値が半端になる理由が考えられないからである。

2つの非可逆的自己相似格子が互いに強い意味で MLD 関係にある場合、対応する2つの trace map が定義する2種の非線形力学系は同値になるから、エネルギースペクトルの  $f(\alpha)$ -spectrum が両方で共通になることが期待される。これを確認することは、今後に残された重要な課題の一つと言える。

## 5 まとめ

生成規則によって作られる格子、すなわち、自己相似格子の分類から議論した。分類基準としては次のようなものを採り上げた：

<sup>35</sup>Pisot 非可逆的自己相似格子の中で、PD 格子や Copper-Mean 格子のように不変量を持つ格子は全体の内でごく少数である [30],[20],[11].

1. 生成規則は可逆的か.
2. 自己相似格子は対称か.
3. 生成規則の随伴行列の固有値は Pisot 性を持つか.

これらの分類基準は、分類の詳しさに関して順序づけることはできないが、互いに全く独立でもない。第 1 の基準を満たす格子、すなわち可逆的自己相似格子は、残りの 2 つの基準も満たし、自己相似格子の選良と言える。当然、自己相似格子全体の中では圧倒的少数派である。この格子は準周期的であり、1 次元準結晶と言える。この格子については、構造的にもその電子状態についても、従来の研究により研究し尽くされていると言ってよい。構造的には、随伴行列  $M$  が unimodular で、この性質を持つ各随伴行列に対して 1 種類存在する。また、随伴行列の「因数分解」により MLD 分類が可能である。

非可逆的自己相似格子は分類基準 2, 3 によりさらに細かく分類できるが、この 2 つの分類基準は互いに独立である。第 3 の基準を満たす格子、すなわち Pisot 自己相似格子は、他の自己相似格子よりも構造的な一様性が強い。そのため、Pisot 自己相似格子の構造因子  $S(Q)$  は Bragg peak だけから成る。自己相似格子が対称か否かは関連する trace map が半不変量（または不変量）を持つか否かと直結している。他方、自己相似格子が可逆的か否かは関連する trace map が可逆的か否かと直結しているのみならず、保存的か否かも直結している。本稿では対称自己相似格子に絞って議論した。

可逆的自己相似格子の trace map は不変量  $I(x, y, z)$  を持ち、しかもこの不変量の値はポテンシャルの強さ  $\Delta$  に依存する。そのために、エネルギースペクトルの multifractal 性を特徴付ける  $f(\alpha)$ -spectrum は普遍性を示さない。統計力学における相転移の臨界的性質の分類と比較した場合、このような結果はコスターリッツ・サウレス転移と類似の状況と言える [2]。

非可逆的な Pisot 自己相似格子の格子の trace map は非保存的である。また、一部の例外を除いて不変量を持たない。そのために、 $f(\alpha)$ -spectrum は普遍性を持つ。相転移の臨界的性質の分類と比較した場合、この結果は通常相転移に対応する。他方、trace map の attractor は不変曲面  $I(x, y, z) = 0$  と一致する。周期系 ( $\Delta = 0$ ) の trace map の軌道はこの不変曲面上に制限されている。その結果、Pisot 自己相似格子の trace map のサイクル（周期点）は周期系のそれと一致する。

自己相似格子全体の中における可逆的自己相似格子および Pisot 対称自己相似格子の位置づけは図 19 に示したとおりである。これらの自己相似格子は、量的には自己相似格子全体の極一部を占めているのに過ぎない。Pisot 対称自己相似格子の電子状態の性質に普遍性があることの発見は大きな成果と言えるが、その電子状態についてはいくつかの未解明の問題が残されている。他方、非対称自己相似格子や非 Pisot 自己相似格子の電子状態の性質については全く手つかずと言っても過言ではない。さらに、本稿でとりあげた 2 元自己相似格子は自己相似格子全体から見ると優等生的で、3 元以上の自己相似格子はその分類も電子状態の研究も極めて困難である [35]。自己相似格子の電子状態の全貌が明らか

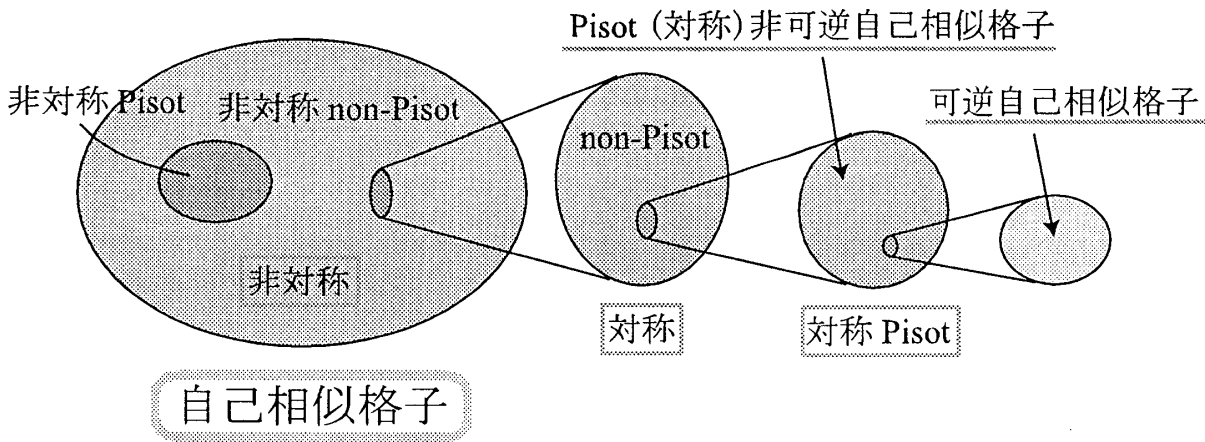


図 19: 様々な種類の自己相似格子の間の相互関係

になるのはまだ遠い先のことに思われる。

本論文では強結合近似を仮定したが，1次元 Schrödinger 方程式に対しても transfer matrix が使用できるので，本論文の結果は，人工超格子中の電子状態に対しても適用できる。さらに，層状物質中の超音波，電磁波（光），スピン波の伝搬に対しても基本的には適用できる [36]。例えば，marginal critical state は局在状態に極めて近い臨界状態であるが，この状態をチャンネルとした場合，光の速度が極端に低下することが予想できる。

## 謝辞

本稿は筆者の修士論文を基にしています。指導教官であり準結晶，準周期系の初歩から多くを教えて頂いた新関先生，並びにこの研究を行う際に快く相談を引き受けて下さいました研究室の先輩である藤田伸尚氏に深く感謝致します。

## A 2次体の数論

### いくつかの記号と定義

整数全体の集合を  $\mathbf{Z}$  で表し, 有理数全体の集合を  $\mathbf{Q}$  で表す. 以下の議論に登場する2次の無理数  $\tau, \omega$  は本文で定義されたものを用いる. 2次無理数の集合  $\mathbf{Q}[\tau] \equiv \{x+y\tau \mid x, y \in \mathbf{Q}\}$ <sup>36</sup> は四則 (加算, 減算, 積, 商) で閉じており, 体 (field, Körper) と呼ばれる. 2次体  $\mathbf{Q}[\tau]$  の部分集合  $\mathbf{Z}[\tau] \equiv \{x+y\tau \mid x, y \in \mathbf{Z}\}$  は 1 と  $\tau$  を生成元とする加群 ( $\mathbf{Z}$ -module) であり, 加算, 減算, 積で閉じている. そこで,  $\mathbf{Z}[\tau]$  の要素を整数と呼ぶことにする. 整数  $\gamma$  に対して, その逆数  $1/\gamma$  も整数ならば,  $\gamma$  は unit と呼ばれる.  $\tau$  が unit となるための必要十分条件は, 随伴行列  $M$  が unimodular であること (従って,  $|\tau\tau'| = 1$  となること) である. 例えば, 式 (29) の後のリスト中の 8 個の無理数のうち黄金比を含む 4 個は unit である. 第 2 の 2 次無理数  $\omega$  を用いて加群  $\mathbf{Z}[\omega] \equiv \{x+y\omega \mid x, y \in \mathbf{Z}\}$  を定義する. 特に,  $\tau$  が unit ならば  $\tau^{-1}\mathbf{Z}[\omega] = \mathbf{Z}[\omega]$  が成り立つ<sup>37</sup>. 2 種の加群  $\mathbf{Z}[\omega], \mathbf{Z}[\tau]$  の生成元 (基底) は 2 個であるが, 最後に, 無限個の生成元を持つ加群を次式により定義する:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}\{\omega\} &\equiv \mathbf{Z}[\omega] \cup \tau^{-1}\mathbf{Z}[\omega] \cup \tau^{-2}\mathbf{Z}[\omega] \cup \dots \\ &= \left\{ \nu_0 + \frac{\nu_1}{\tau} + \frac{\nu_2}{\tau^2} + \dots \quad (\text{有限項で切れる}) \mid \nu_j \in \mathbf{Z}[\omega] \right\}. \end{aligned} \quad (83)$$

Fibonacci 格子や Silver-Mean 格子など多くの自己相似格子の場合に  $b = 1$  となるが, この場合,  $\mathbf{Z}[\omega] = \mathbf{Z}[\tau]$  および  $\mathbf{Z}\{\omega\} = \mathbf{Z}\{\tau\}$  が成り立つ.

### $\beta$ -進展開

実数の 10-進展開や 2-進展開については良く知られているが, それはより一般化することができる.  $\beta$  を 1 より大きな整数もしくは無理数とする. 半開単位区間  $I = [0, 1)$  からその中への写像を

$$x \in I \quad \rightarrow \quad x' = \beta x - [\beta x] \in I \quad (84)$$

により定義することができる. ただし,  $[*]$  はガウス記号である. 初期値を  $x \equiv x^{(1)}$  としてこの写像を繰り返すと軌道  $\{x^{(n)}\}$  が生成される:

$$x^{(n+1)} = \beta x^{(n)} - [\beta x^{(n)}]. \quad (85)$$

つまり, 小数部分に  $\beta$  を掛けて, 整数部分を抜きとる操作を行っている. 数列  $\{x^{(n)}\}$  の各メンバーに対して,  $d_n \equiv [\beta x^{(n)}]$  により整数を定義する.  $\{d_n\}$  は整数の数列となり, か

<sup>36</sup>記号  $\{\text{数} \mid \text{条件}\}$  は今後しばしば使用されるが, 指定された条件を満たす数全体から成る集合を意味する.

<sup>37</sup> $\tau^{-1}\mathbf{Z}[\omega]$  は  $\mathbf{Z}[\omega]$  に属する数の各々を  $\tau$  で割ったもの全体から成る集合を表す.



つ  $0 \leq d_n < \beta$  を満たしている. この整数列を用いると,  $x$  は

$$x = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d_n}{\beta^n} \rightarrow 0.d_1d_2\cdots|_{\beta} \quad (86)$$

のように展開することができる. このような展開は,  $x$  が 1 より小さい場合に限ったものではない.  $x$  が 1 より大きい場合, 不等式  $\beta^k < x$  を満たす最大の整数  $k$  が決まるが, その場合,  $\beta^{-k}x$  が上記のように展開することができる. 従って,

$$x = \sum_{n=-k}^{\infty} \frac{d_n}{\beta^n} \rightarrow d_{-k}d_{-k+1}\cdots d_0.d_1d_2\cdots|_{\beta} \quad (87)$$

となる. 正実数  $x$  のこのような表示を  $x$  の  $\beta$ -進展開と呼ぶ.

$\beta$ -進展開に登場する写像は最も簡単な非線形力学系を定義する.  $\beta$ -進展開には次の 3 個のケースがある:

- 1) 有限ステップで切れる.
- 2) 有限ステップでサイクルに落ちる ( $x$  が循環小数となる).
- 3) 残りのケース.

第 3 のケースはカオスと考えて良い (例外がないわけではない).

ここで注意すべきは,  $\beta$  が無理数の場合, 条件  $0 \leq d_n < \beta$  を満たす整数列  $\{d_n\}$  から式 (86) によって数  $x$  を定義しても, それが単位区間  $I$  に属することは保証されていないことである. すなわち,  $\beta$ -進展開に現れる整数列が全くランダムになることはない. 例えば,  $\beta$  が黄金比  $\tau_G$  の場合には,  $d_i = 0$  または 1 となるが,  $d_i \times d_{i+1} = 0$  となる必要がある (1 は連続しない). 黄金比は関係式  $\tau_G^2 = 1 + \tau_G$  を満たすので, もし,  $d_i = d_{i+1} = 1$  ならば,  $\frac{1}{\tau_G} + \frac{1}{\tau_G+1} = \frac{1}{\tau_G-1}$  と繰り上がってしまうためである.

特に,  $\beta$  が 2 次無理数で Pisot 数となる場合が重要である. この場合, 実数  $x$  の  $\beta$ -進展開が有限ステップで切れるための必要十分条件は,  $x$  が次の集合に属することである:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}\{\beta\} &\equiv \mathbf{Z}[\beta] \cup \beta^{-1}\mathbf{Z}[\beta] \cup \beta^{-2}\mathbf{Z}[\beta] \cup \cdots |_{\beta} \\ &= \left\{ \nu_0 + \frac{\nu_1}{\beta} + \frac{\nu_2}{\beta^2} + \cdots \quad (\text{有限項で切れる}) \mid \nu_j \in \mathbf{Z}[\beta] \right\}. \end{aligned} \quad (88)$$

$\mathbf{Z}\{\beta\}$  は加法, 減法, 積の演算で閉じており, 数学的には拡張された整数の集合となる. 他方, 実数  $x$  の  $\beta$ -進展開が循環小数となるための必要条件は,  $x$  が  $\mathbf{Q}[\beta] \equiv \{x+y\beta \mid x, y \in \mathbf{Q}\}$  に属することである.  $\mathbf{Z}\{\beta\}$  は  $\mathbf{Q}[\beta]$  の部分集合だから, 前者に属する数は除外しなければならない. 従って, 循環小数となる数全体から成る集合を  $\mathbf{Q}'[\beta]$  と表せば,  $\mathbf{Q}'[\beta] = \mathbf{Q}[\beta] - \mathbf{Z}\{\beta\}$  となる.

例えば  $x$  が周期  $p$  の純循環小数となる場合,

$$0.d_1d_2\cdots d_p d_1d_2\cdots|_{\beta} = 0.\overline{d_1d_2\cdots d_p}|_{\beta} \quad (89)$$

$$= \frac{1}{1-\beta^{-p}} \left( \frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \cdots + \frac{d_p}{\beta^p} \right) \quad (90)$$

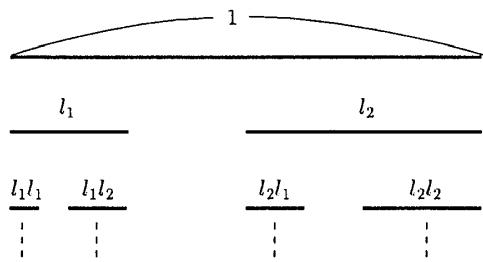


図 20: Cantor set

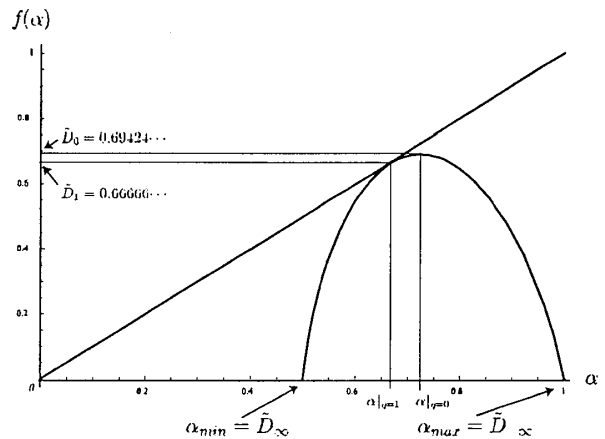


図 21: Cantor set の  $f(\alpha)$ -spectrum

$$= \frac{\beta^{p-1}d_1 + \beta^{p-2}d_2 + \dots + d_p}{\beta^p - 1} \quad (91)$$

と表すことができる. 従って,  $x$  は確かに  $\mathbf{Q}[\beta]$  に属する. 周期  $p$  は  $x(\beta^p - 1) \in \mathbf{Z}\{\beta\}$  を満たす最小の整数として決まる. なお, 黄金比  $\tau_G$  による  $\beta$ -進展開の場合には  $\frac{1}{2}$  は 3 周期の純循環小数に展開される. 具体的には,  $\frac{1}{2} = 0.\overline{100}|_{\tau_G}$  となる. このことは黄金比が満たす関係式  $\tau_G^2 = 1 + 2\tau_G$  を用いて示すことができる.

以上の議論は,  $\beta$  が整数の場合にも基本的には成り立つ. この場合,  $\mathbf{Z}\{\beta\}$  は整数および分母が  $\beta$  のあるべきの約数となるような有理数全体からなる. また,  $\mathbf{Q}'[\beta]$  はそれ以外の有理数全体からなる. なお,  $\beta$  が整数の場合  $\mathbf{Q}[\beta] = \mathbf{Q}$  となるので,  $\mathbf{Q}'[\beta] = \mathbf{Q} - \mathbf{Z}\{\beta\}$  となる. 特に,  $\beta = 2$  の場合,  $\mathbf{Q}'[\beta]$  は分母が奇数因子を含むような有理数全体からなる.

## B multifractal 構造

multifractal 構造をもつ集合の代表として, 図 20 のような Cantor set を考える. この集合は  $l_1 + l_2 < 1$  としたとき, 1 の長さの線分からそれに含まれる部分をくり抜いて,  $l_1$  と  $l_2$  の部分だけを残す場合を考える. これを  $n$  回繰り返して得られる集合を, 第  $n$  世代の Cantor set と呼ぶことにする. この集合は場所によって線分の長さが違っている. さらに第  $n$  世代の Cantor set 各区間  $I_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N_n, N_n = 2^n$ ) に適当な規則により確率  $p_i$  付与する. 定義により,  $\sum_i p_i = 1$  となる. 極限として得られるこのような集合を特徴付けるために, 局所次元  $\alpha$  と  $f(\alpha)$  という量を導入する. この解析方法は, 1987 年に T. C. Halsey らによって考案され [37],  $f(\alpha)$ -spectrum の方法として知られている. さらに M. Kohmoto によって, 上記の量を熱力学関数と対応をつけて定式化された [38]. ここでは, 集合全体の特徴を定量的に表す一般化次元  $D_q$  と, 局所的な集合の特徴を表す局所次元 (singularity)  $\alpha$  が  $f(\alpha)$  という量で関係付けられることを簡単に示す.

始めに,  $l_1 = l_2 = \dots = l_{N_n} \equiv l^{(n)}$  である場合の一般化次元  $D_q$  を次のように定義する:

$$D_q \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{q-1} \frac{\log \chi_n(q)}{\log l^{(n)}} \quad , \quad \chi_n(q) = \sum_{i=1}^{N_n} p_i^q. \quad (92)$$

$D_q$  は  $q$  の値によって, いろいろな種類の次元を包括している:

$$D_0 = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log N_n}{\log l^{(n)}} \quad , \quad D_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} D_q = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\log l^{(n)}} \left( \sum_{i=1}^{N_n} p_i \log p_i \right)$$

$$D_2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\log l^{(n)}} \left( \log \sum_{i=1}^{N_n} p_i^2 \right), \quad \dots \quad (93)$$

容量次元  $D_0$ , 情報次元  $D_1$ , 相関次元  $D_2$ ,  $\dots$  と,  $D_q$  はよく知られた次元を  $q$  という量で統一的に表すことができる.

しかし (92) 式では図 20 のような線分の長さが場所によって異なった集合には, このままでは適用ができない. そこでこれを拡張するために次の量を導入する:

$$\Gamma_n(q, \beta) = \sum_{i=1}^{N_n} p_i^q l_i^\beta. \quad (94)$$

$q$  を決めて両辺  $n \rightarrow \infty$  の極限をとったときに, 右辺は  $\beta$  がある値以下ではゼロに収束するが, その値を超えると発散する. その境界における  $\beta$  の値を  $\beta(q)$  と記し, 拡張一般化次元  $\tilde{D}_q$  を関係式  $\beta(q) = (1-q)\tilde{D}_q$  により定義する. 一般に  $\tilde{D}_q < D_q$  を満たしている. また, 幾何学的な構造のみに着目する場合には  $p_i = 1/N_n$  (一定) とすればよい. 詳しい計算は参考文献 [37],[38]にあるので, 本稿では結果だけを記すことにする.

局所次元  $\alpha$  という量を確率測度  $p_i$  に対して定義する:

$$p_i \equiv l_i^\alpha. \quad (95)$$

また, multifractal 解析でもっとも大事な関数に  $f(\alpha)$  という関数がある. この量はある集合のうち局所次元が  $\alpha$  である部分集合の容量次元を表している.  $\alpha$  と  $q$  の関係は

$$\alpha = \frac{\partial \ln \Gamma(q, \beta)}{\partial q} \left[ \frac{\partial \ln \Gamma(q, \beta)}{\partial \beta} \right]^{-1} \quad (96)$$

で与えられる. ただし, 右辺を計算した後で,  $\beta = \beta(q)$  とおくものとする. さらに,  $f(\alpha)$  は拡張一般化次元  $\tilde{D}_q$  とは次の関係式により結ばれる:

$$\tilde{D}_q = \frac{1}{1-q} [f(\alpha) - \alpha q]. \quad (97)$$

$\alpha$  と  $f(\alpha)$  は  $q$  の関数として, 自己相似構造をもつ集合 (1次元) の各線分  $l_i$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) が与えられたときに,  $q$  の値に対してそれぞれ定量的に求められる. 逆に,  $\alpha$  と  $f(\alpha)$  に対して, 対応する  $\tilde{D}_q$  が決まる. 図 20 の Cantor set で,  $l_1 = \frac{1}{4}, l_2 = \frac{1}{2}$  として計算した結果が図 21 である.  $f(\alpha)$  は  $q = 0$  で最大値  $f(\alpha) = \tilde{D}_0$  をとり,  $q \rightarrow \infty$  のときに  $\alpha_{\min}$  で  $f(\alpha) = 0$ ,  $q \rightarrow -\infty$  のときに  $\alpha_{\max}$  で  $f(\alpha) = 0$  である上に凸の関数となる. 図 20 の Cantor set では, 局所的に連続的である ( $\alpha = 1$ ) 部分から  $\alpha = 0.5$  で表される部分まで, 図 21 のように分布していることを表している.

## 参考文献

- [1] M. Kohmoto and L. P. Kadanoff and C. Tang *Phys. Rev. Lett.* **50**, (1983) 1870
- [2] M. Kohmoto, B. Sutherland and C. Tang *Phys. Rev. B* **35**, (1987) 1020
- [3] H. Hiramoto and M. Kohmoto *Int. J. Mod. Phys. B***6**, (1992) 281
- [4] M. Severin, M. Dulea and R. Riklund *J. Phys. Condens. Matter* **1**, (1989) 8851
- [5] S. Sil, S. N. Karmakar and R. K. Moitra *Phys. Rev. B* **48**, (1993) 4192
- [6] F. Wijnands *J. Phys. A: Math. Gen* **22**, (1989) 3267
- [7] M. Kolář and M. K. Ali *Phys. Rev. A* **42**, (1990) 7112
- [8] Z. Y. Wen, F. Wijnands and J. S. W. Lamb *J. Phys. A* **27**, (1994) 3689
- [9] M. Torikai, K. Niizeki and T. Odagaki *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, (2001) 2918
- [10] A. Hopf, O. Knill and B. Simon *Commun. Math. Phys.* **174**, (1995) 149
- [11] M. Baake, U. Grimm and D. Joseph *Int. J. Mod. Phys. B***7**, (1993) 1527
- [12] M. Baake, M. Schlottmann and P. D. Jarvis *J. Phys. A* **24**, (1991) 4637
- [13] K. Niizeki *J. Alloys. Comp.* **342**, (2002) 213
- [14] K. Niizeki *unpublished*
- [15] J. M. Luck, C. Godrèche, A. Janner and T. Janssen *J. Phys. A: Math. Gen* **26**, (1993) 1951
- [16] M. Kolář *Phys. Rev. B* **47**, (1993) 5489
- [17] M. Baake and J. Roberts *J. Stat. Phys.* **74**, (1994) 829
- [18] K. Niizeki and R. Endou *to be published*
- [19] J. Perière *J. Stat. Phys.* **62**, (1991) 411
- [20] M. Inoue, T. Takemori and H. Miyazaki *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, (1991) 3640
- [21] B. Kramer and A. Makinnon *Rep. Prog. Phys.* **56**, (1993)1469
- [22] K. Niizeki and E. Yagi *J. Phys. Soc. Jpn* **66**, (1997) 1387

- [23] J. Q. You, J R Yan, T. Xie, X. Zeng and J. X. Zhong *J. Phys. Condens Matter* **3**, (1991) 7255
- [24] M. Inoue, T. Takemori and H. Miyazaki *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, (1992) 969
- [25] M. Kohmoto and Y. Oono *Phys. Lett.* **102A**, (1984) 145
- [26] H. Hiramoto and M. Kohmoto *Phys. Rev. Lett.* **62**, (1989) 1989
- [27] P. A. Kalugin, A. Yu Kitaev and L. C. Levitov *Pis'ma. Zh. Eksp. Teor. Fiz* **41**, (1985) 119 [*JETP Lett.* **41**, 119 (1985)]
- [28] M.J.Luck *Phys. Rev. B* **39**, (1989) 5834
- [29] P. Collet and J. P. Eckmann *Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems* (Birkhauser, Boston, 1980)
- [30] G. Gumbs and M. K. Ali *Phys. Rev. Lett.* **60**, (1988) 1081
- [31] M. Kolář and M. K. Ali *Phys. Rev. A* **39**, (1988) 6358
- [32] N. Fujita and K. Niizeki *Phys. Rev. Lett.* **85**, (2000) 4924
- [33] N. Fujita and K. Niizeki *Phys. Rev. B* **64**, (2001) 144207
- [34] K. Niizeki and R. Endou *to be published*
- [35] K. Iguchi *Phys. Lett. B* **216**, (1996) 37
- [36] E.L.Albuquerque and M.G.Cottam *Phys. Rep.* **376**, (2003) 225
- [37] T. C. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia and B. I. Shraiman *Phys. Rev. A* **33**, (1986) 1141
- [38] M. Kohmoto *Phys. Rev. A* **37**, (1988) 1345