

不規則系の統計物理学 (Ⅲ)

京大基研 松田博嗣

§ 7. の続き (一次元系への応用)

linear chain では $p = 1$ である。

$\mathcal{K}_1 = \mathbf{T}' \mathbf{T}^{n_0} \mathbf{T}' \mathbf{T}^{n_1} \mathbf{T}' \dots \mathbf{T}' \mathbf{T}^{n_\ell}$ としよう。ここで $\mathbf{T}'$ は impurity site の transfer matrix であり, $n_j = 0, 1, \dots, s, j = 0, 1, 2, \dots, \ell$ である。前に与えた変換式により $\bar{\mathbf{T}} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{S} = \begin{pmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & r^{-2} \end{pmatrix}$ を導入する。(ここでは $\det \mathbf{T} = 1$ としておく。) $r = \exp(i\frac{\lambda}{2})$ とすれば $2 \cos \lambda = \text{Trace } \mathbf{T}$ と書ける。この表示で

$$\bar{\mathbf{T}}' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T}' \mathbf{S} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (7.17)$$

$$\mathbf{T}(k_j, k_{j+1}) = \mathbf{T}' \mathbf{T}^{n_j} \text{ とすると}$$

$$\begin{aligned} \alpha_j &= a r^{2n_j}, & \beta_j &= b r^{-2n_j} \\ r_j &= c r^{2n_j}, & \delta_j &= d r^{-2n_j} \end{aligned} \quad (7.18)$$

これにより

$$\rho_j \equiv a_j b_j^{-1} b_{j-1}^{-1} = - \frac{r^{2n_j - 2n_{j-1}} \det \mathbf{T}'}{(a r^{2n_{j-1}-1} + d r^{-2n_{j-1}-1})(a r^{2n_{j-2}-2} + d r^{-2n_{j-2}-2})} \quad (7.19)$$

従って

$$Z(1, \ell) = \frac{\rho_1}{1 + \frac{\rho_2}{1 + \frac{\rho_{n-1}}{1 + \rho_n}}} \quad (7.20)$$

この連分数の収束性を調べるために Worpitzky の定理を援用しよう。

(H. S. Wall "Continued Fraction" North-Holland Co. p-43)

この定理によれば

$$\left\{ \begin{array}{l} |\rho_j| \leq \frac{1}{4} \quad (j = 1, 2, \dots) \\ \rho_j(x) \text{ が } x_1 < x < x_2 \text{ なる domain } D \text{ 上の } x \text{ の関数} \end{array} \right\} \text{ ならば}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a) } Z(1, \ell) \text{ は } D \text{ で uniformly に } Z \text{ に収束する。} \\ \text{(b) } \left| \frac{1}{1+Z(1, \ell)} - \frac{4}{3} \right| \leq \frac{2}{3} \\ \text{(c) } \frac{1}{4} \text{ は best constant である。つまり } \rho_j \text{ を } \frac{1}{4} \text{ より大きくとると, (a) とならないことがある。} \end{array} \right.$$

$|\text{Trace } T| \leq 2$ とすれば λ は real で

$$|\rho_j| = \frac{|\det T'|}{|T_r(T' T^{nj-1})| |T_r(T' T^{nj-2})|}$$

となる。

pure T system に対して $H_1 = T^N$ が成立している。(T は transfer matrix)。もし, x の区間 (x_1, x_2) が pure T system の band の中にあり, pure $(T' T^n)$ system の band gap にあるならば $(0 \leq n \leq s)$, $|\text{Trace } T| \leq 2$ で, $|\rho_j| \leq \frac{1}{4}$, 従って

$$|\text{Trace } (T' T^n)| > 2 \sqrt{|\det T'|}$$

が成立することを示しており, 種々の $(T' T^n)$ $(0 \leq n \leq s)$ を成分とする混合系において, $|\rho_j| \leq \frac{1}{4}$ が常に成立している。

例). Hückel 近似の electron system

この問題に対する行列式は

$$\begin{vmatrix} \alpha_1 - E & \beta_{12} & & \\ \beta_{21} & \alpha_2 - E & & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha_N - E \end{vmatrix} = 0 \quad (7.21)$$

$$\begin{cases} \alpha_j : \text{クーロン積分} \\ \beta_{ij} : \text{共鳴積分} \end{cases}$$

$\beta_{ij} = \beta$, $\alpha_i = \alpha$ or α' のような簡単化を行う。

このような model では

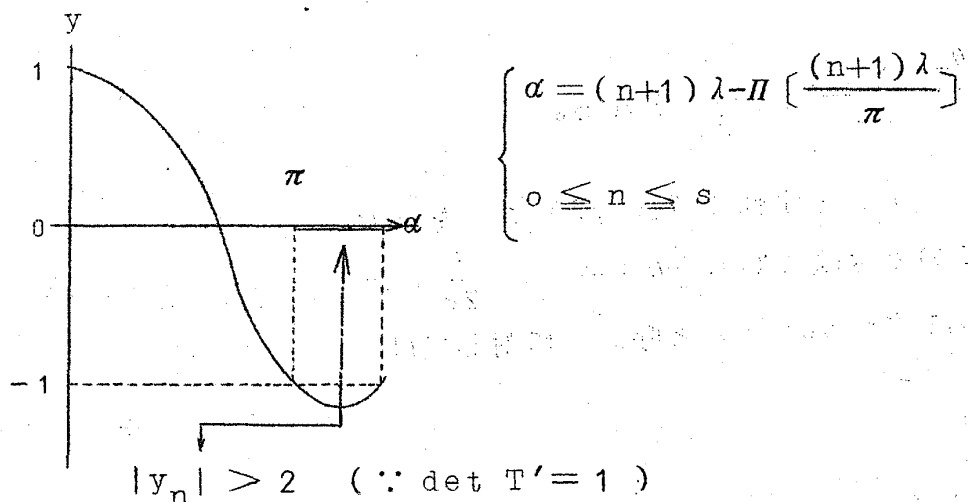
$$\begin{cases} E = \alpha + 2\beta \cos \lambda \\ r = \exp \left(i \frac{\lambda}{2} \right) \end{cases} \quad \lambda: \text{real (because in band)}$$

ここで

$$\text{Trace} (T' T^n) \equiv y_n = 2 \left\{ \cos (n+1)\lambda + \sigma \frac{\sin (n+1)\lambda}{\sin \lambda} \right\}$$

$$\left(\sigma = -\frac{1}{2} \frac{\Delta \alpha}{\beta}, \quad \Delta \alpha = \alpha' - \alpha \right)$$

$y = \cos \alpha + \sigma \frac{\sin \alpha}{\sin \lambda}$ を $\sigma < 0$ の場合に図示すると、下図のようになる。



松田博嗣

上図の太線の部分が前述の不等式,

$$|\text{Trace}(\mathbf{T}' \mathbf{T}^n)| > 2 \sqrt{|\det \mathbf{T}'|}$$

を満たす部分に対応しており, すべての n に対して α がこの部分にあれば band gap が存在することになる。

最終的な結果は

1) $\sigma < 0$

$$\sigma < -\sigma_c^-(s, \lambda) \equiv -\cot\left(\frac{\theta_-(s, \lambda)}{2}\right) \sin \lambda$$

$$\theta_-(s, \lambda) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \min_{0 \leq n \leq s} \left\{ (n+1)\lambda - \left[\frac{(n+1)}{\pi} \lambda - \varepsilon \right] \pi \right\}$$

2) $\sigma > 0$

$$\sigma > \sigma_c^+(s, \lambda) \equiv \tan \frac{\theta_+(s, \lambda)}{2} \sin \lambda$$

$$\theta_+(s, \lambda) = \max_{0 \leq n \leq s} \left\{ (n+1)\lambda - \left[\frac{n+1}{\pi} \lambda \right] \pi \right\}$$

つまり

$\beta < 0$ では

$$\Delta \alpha > 2|\beta| \sigma_c^+(s, \lambda) \quad \text{または} \quad \Delta \alpha < -2|\beta| \sigma_c^-(s, \lambda)$$

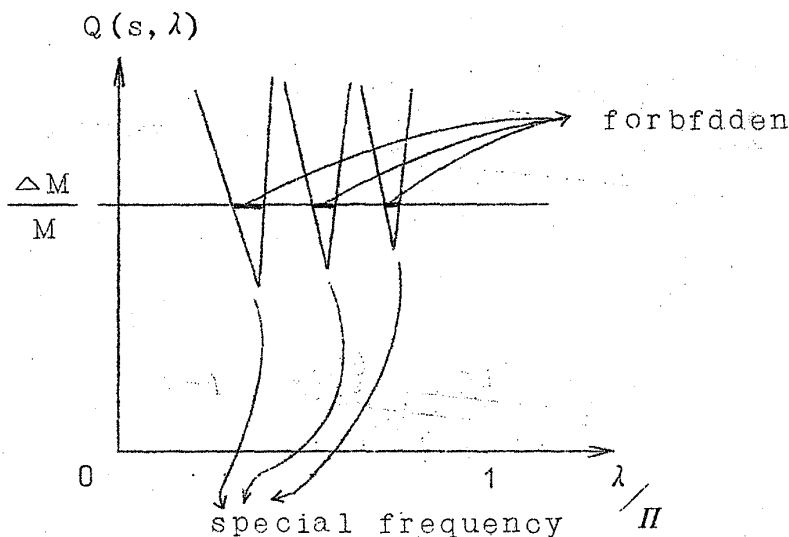
に対して, λ は band gap の中になることになる。この結果を格子振動の isotopic impurity に適用しよう。

$M' - M = \Delta M$ とおくと,

$$\frac{\Delta M}{M} > Q(s, \lambda) \equiv \cot \frac{\theta_-(s, \lambda)}{2} \cot \frac{\lambda}{2} \quad \text{となる。}$$

$\lambda = \frac{b}{a} \pi$ (a, b は互に素な整数で $b < a$) とすれば $\theta_-(s, \lambda)$ で s を ∞ にした $\theta_-(s, \lambda)$ は $\theta_-(\infty, \lambda) = \frac{\pi}{a}$ このときは $Q(\infty, \frac{b}{a} \pi) = \cot \frac{\pi}{2a} \cot \frac{b\pi}{2a}$ このような λ (これを special frequency と呼ぶ) に対しては forbidden になる。

$\frac{\Delta M}{M} \geq \cot \frac{\Pi}{2a} \cot \frac{a-1}{a} \Pi = 1$ と出来る。(つまり $b = a - 1$ とする)。
 従って $\frac{M'}{M} > 2$ を満たさない限り special frequency は生じない。満たす
 場合は $\lambda = \frac{a-1}{a} \Pi$ だから special frequency は無数にある。



§ 8. 多次元の disordered system に於る spectral gap

この節では、多次元系に対しての考察を連分数法を援用することにより、進めよう。系の記述する $\mathcal{K}_N(x)$ は

$$\mathcal{K}_N(x) = \begin{pmatrix} A_1 & B_2 & & \\ & B_2^+ & A_2 & \\ & & & \ddots \\ & & & & A_N \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

$\det \mathcal{K}_N(x) = 0$ を満たす x が系の固有値に相当する。そして区間 $x_1 < x < x_2$ で $\det \mathcal{K}_N(x) \neq 0$ ならば、そこが spectral gap になっている。これを連分数で書くと

松田博嗣

$$\det(1+Z) \neq 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \& \\ Z = \lim_{\ell \rightarrow \infty} Z(1, \ell) \\ Z(1, \ell) = \frac{a_1 b_1^{-1}}{1 + \frac{a_2 b_2^{-1}}{b_1^{-1}}} \end{array} \right. \quad (8.2)$$

$$1 + \frac{a_{\ell-1} b_{\ell-1}^{-1}}{1 + \frac{a_{\ell} b_{\ell}^{-1}}{b_{\ell-1}^{-1}}} b_{\ell-2}^{-1}$$

(a_i, b_j の具体的な形は前節に与えてある。)

一次元系では a_i, b_i は単なる数となり、従って (8.2) の収束性を調べることにより、Spectral gap に対する考察を進め得た。多次元系への考察の第一歩として、ここでは 2 次元の Rosenstock - Newell model を考えよう。この場合には (8.2) の a_i, b_i は matrix となり $Z(1, \ell)$ の収束性を論ずることはむづかしい。そこで、non-central force constant は全て一定とする。まず matrix A の bound なる量を次式で定義しよう。

$$\langle A \rangle \equiv \max_{\mathbf{x}} \frac{N(A\mathbf{x})}{N(\mathbf{x})} \quad (\geq 0) ; \quad A \text{ は } p \times p \text{ の行列} \quad (8.3)$$

ここで N は norm であり、

$$N(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{\mathbf{x}^+ \mathbf{x}}$$

A が Hermite ならば $\langle A \rangle$ は A の最大固有値に等しいことが証明出来る。一般に

$$\langle A+B \rangle \leq \langle A \rangle + \langle B \rangle, \quad \langle AB \rangle \leq \langle A \rangle \langle B \rangle$$

が成立する。

次に $\langle A \rangle < 1$ のとき、次の不等式が成立することを証明しよう。

$$\langle (1+A)^{-1} \rangle \leq \frac{1}{1-\langle A \rangle} \quad (8.4)$$

($\because$)

$$(1+A)^{-1} = 1 - A(1+A)^{-1}$$

従って

$$\langle (1+A)^{-1} \rangle \leq 1 + \langle A \rangle \langle (1+A)^{-1} \rangle$$

これにより

$$\langle (1+A)^{-1} \rangle \leq \frac{1}{1-\langle A \rangle}$$

(8.4) を $Z(1, \ell)$ に用いることにしよう。

$$\langle Z(1, \ell) \rangle \leq \langle a_1 b_1^{-1} \rangle \langle \frac{1}{1+Z(2, \ell)} \rangle \langle b_0^{-1} \rangle \quad (8.4) \text{ より}$$

$$\leq \langle a_1 b_1^{-1} \rangle \langle b_0^{-1} \rangle \frac{1}{1-Z(2, \ell)} \quad (8.5)$$

$$|\rho_j| \equiv |\langle a_j b_j^{-1} \rangle \langle b_{j-1}^{-1} \rangle| \text{ とする。}$$

$|\rho_j| \leq \frac{1}{4} \quad (j=1, 2, \dots)$ になっているとすれば (8.5) と Worpitzky の定理を援用して

$$\det(1+Z) \neq 0$$

つまり band gap になっている。

具体的な例としての Rosenstock-Newell model では

$$B_j = c \begin{cases} 1 & : \text{unit matrix} \\ c & : \text{constant} \end{cases}$$

これより

$$\begin{cases} b_j = -\frac{A_j}{c} \\ a_j = -1 \end{cases} \text{ となる。}$$

松田博嗣

従って

$|\rho_j| = c^2 \langle A_j^{-1} \rangle \langle A_{j-1}^{-1} \rangle$, これが $\leq \frac{1}{4}$ ならば band gap になっている。これを Saxon-Hutner 型定理にするために $A_j = A$ for all j と取ってみる。

ここで A_j を diagonal にする表示をとると

$$\mathcal{H}_N(x) = \begin{pmatrix} a_1 & & & & & \\ & c & & & & \\ & & a_l & & & \\ & c & & a_1 & & \\ & & c & & a_l & \\ & & & & & a_1 \\ & & & & & & a_l \end{pmatrix} \quad \text{と出来る。}$$

これにより x が band gap にある条件として $|c| \langle A^{-1} \rangle < \frac{1}{2}$ となる。

また, $A_j = A^{(\alpha)}$ for all j ならば $|c| \langle A^{(\alpha)-1} \rangle < \frac{1}{2}$ for all α

(α) は isotope のある周期的配列を示す。これならば, その任意の混合系において $|\rho_j| \leq \frac{1}{4}$ であり band gap になっている。以上の考察は 3 次元に対しても拡張出来る。

§ 9. Some Theorems on the Eigenvalues of Hermitian Matrices

以下に, Random System を取り扱う場合に有効な定理を列記しよう。

1) Modication theorem (MDTで略記する。)

2つの Hermite form $\mathcal{H}, \mathcal{H}'$ がある。(次式で与えられる。)

$$\begin{cases} \mathcal{H} = K + \sum_{h=1}^S (X_h Y_h + \bar{X}_h \bar{Y}_h) & (9.1a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathcal{H}' = K + \sum (X_h Y'_h + \bar{X}_h \bar{Y}'_h) & (9.1b) \end{cases}$$

ここに

$$\left\{ \begin{array}{l} K = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N k_{ij} \cdot \bar{x}_i x_j \quad \bar{k}_{ij} = k_{ji} \end{array} \right. \quad (9.2a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} X_h = \sum_{i=1}^N a_{hi} x_i \quad X'_h = \sum_{i=1}^N a'_{hi} x_i \end{array} \right. \quad (9.2b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_h = \sum_{i=1}^N b_{hi} x_i \quad Y'_h = \sum_{i=1}^N b'_{hi} x_i \end{array} \right. \quad (9.2c)$$

固有値を大きさの順に番号づけし、 $\mathcal{M}, \mathcal{M}'$ の n 番目の固有値を Ω_n, Ω'_n とすれば

$$\Omega'_{n-s} \geq \Omega_n \geq \Omega'_{n+s} \quad (9.3)$$

が成立する。

(証 明)

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i |x_i|^2 = 1 \\ \sum_{i=1}^N c_{ki} \cdot x_i = 0 \end{array} \right. \quad (k = 1, 2, \dots, N-1)$$

の条件下で $\mathcal{M}$ のとる最大値は $\{c_{ki}\}$ の函数である。 $\{c_{ki}\}$ について、この最大値の最小値が Ω_n である。

今、 s 個の定まった束縛条件 $X_h = 0$, ($h = 1, 2, \dots, s$) を課し、これにより K より s 個の変数を消去する。 $(N-s)$ 次元の Hermite form $\tilde{\mathcal{M}}$ が得られる。 $\tilde{\mathcal{M}}$ の第 m 番目の固有値を $\tilde{\Omega}_m$ とすれば

$$\text{同じく} \quad \Omega_m \geq \tilde{\Omega}_m \geq \Omega_{m+s}$$

$$\Omega'_m \geq \tilde{\Omega}_m \geq \Omega'_{m+s}$$

故に

$$\Omega'_{n-s} \geq \tilde{\Omega}_{n-s} \geq \Omega_n \geq \tilde{\Omega}_n \geq \Omega'_{n+s}$$

証明終り。

2) Ledermann's theorem

Hermite 行列の r 列とそれに対応する r 行を Hermite 性を保存するように任意に変える。他の部分是不変にしておく。任意の区間 $[\Omega_1, \Omega_2]$ にある固有値の数は、この操作により、高々 $2r$ しか変らない。(具体的な例を考えると、これは格子振動の問題で表面の効果が殆んど、省略出来ることを示している。)

(証明)

$X_h = x_h$ ($h=1, 2, \dots, s$), かつ $\Omega_n \geq E > \Omega_{n+1}$ (E は任意の energy) とすると MDT により

$$\Omega'_{n-s} \geq E > \Omega'_{n+1+s}$$

E 以上の $\mathcal{M}, \mathcal{M}'$ ((9.1) で与えられている。) の固有値の数を $N(E)$, $N'(E)$ とすれば

$$\begin{cases} N(E) = n \\ n-s \leq N'(E) \leq n+s \end{cases} \quad \begin{array}{c} \text{----- } n-s \\ \uparrow \\ E \text{ -----} \\ \text{----- } n+s+1 \end{array}$$

これにより

$$N(E) + s \geq N(E) \geq N'(E) - s$$

$$E'_1 < E_2 \quad \text{なる } E_1, E_2 \text{ に対して}$$

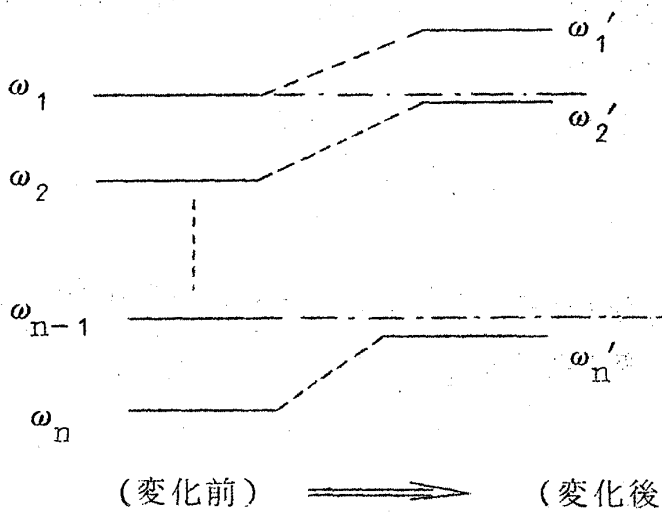
$$N'(E_1) - N'(E_2) + 2s \geq N(E_1) - N(E_2) \geq N'(E_1) - N'(E_2) - 2s$$

ここで $s=r$ とすれば定理は証明されたことになる。

3) Rayleigh の定理

N 個の振動子が相互作用している。固有振動数が $\omega_1 > \omega_2 > \dots > \omega_f$ の関係に番号付けられていることにする。もし、振動子のうちの 1 個の mass (1 方向の振動に関連した) を小さくするか、または、バネを強くすると、全ての固有振動数は増加するか、不変である。しかし、増加するにしても、 ω_n は ω_{n-1} を越えては増さない。

つまり



(証明)

系の Dynamical matrix は、次の Hamiltonian から決まる。

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \frac{\Phi_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}} x_i x_j \quad \text{potential は}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi_{ij} u_i u_j, \quad \text{ここで } u_i \equiv \frac{x_i}{\sqrt{m_i}} \text{ という変換をすると}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Phi_{ij} u_i u_j. \quad \text{MDT をここで用いよう。}$$

$\sum_i x_i^2 = 1, \quad \sum_i c_{ki} x_i = 0 \quad (k=1, \dots, n-1)$ の条件は、ここでは

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N m_i u_i^2 = 1 \\ \sum_i c_{ki} u_i = 0 \quad (k=1, \dots, n-1) \end{cases}$$

となる。mass m_j を m'_j ($< m_j$) に変える。 $u_j \neq 0$ では

$$\sum_{i \neq j} m_i u_i^2 + m_j'^2 u_j^2 = c < 1$$

$\sum_{i=1}^N m_i u_i^2 = 1$ を満足させるためには $u_i \rightarrow \frac{1}{\sqrt{c}} u_i^{(0)}$ とすればよい。従

って Dynamical matrix がもとの $\frac{1}{c}$ になり、 $\Omega_n (\equiv \omega_n^2)$ は大きくなる。

松田博嗣

定理 2) によれば m_j が変っているから $r=1$ となり, 今の場合には振動の方向を決めているから, 1つしか変化しない。

次に potential energy が変わった場合は, これを

$$\frac{1}{2} \kappa \left(\sum_i f_i u_i \right)^2, \quad \kappa; \text{バネ常数}$$

とすると, κ を増せば固有値が増大することは明らか。MDT を用いれば

$X_1 = \sum_i f_i u_i$ であるから, 変る数は 1 個である。

4) Kato の定理

次の固有値方程式を考えよう。

$$\mathcal{M} \phi = \lambda \phi \quad \mathcal{M} \text{ は Hermitian} \quad (9.4)$$

w を $\mathcal{M}$ の近似的な固有ベクトルとし, $(w, w) = 1 = w^+ w$ であるとしよう。次の量, $\rho = (w, \mathcal{M} w)$ を考える。また, 区間 $\alpha < \lambda_r < \beta$ ($r=1, \dots, s$) をとり, この λ_r に対応する $\mathcal{M}$ の固有函数を ϕ_r とすれば, $(w, \phi_r) = 0$ が成り立つとする。

i) $\alpha < \rho < \beta$ とし, $\alpha = \lambda$ とおき得るとき

$$\lambda \geq \rho - \frac{\epsilon^2}{\beta - \rho}, \quad \epsilon^2 \equiv (R, R) \quad (9.5a)$$

$$R \equiv \mathcal{M} w - \rho w$$

ii) $\beta = \lambda$ とおき得るときは

$$\lambda \leq \rho + \frac{\epsilon^2}{\rho - \alpha} \quad (9.5b)$$

(証 明)

$A \equiv (\mathcal{M} - \alpha) w$, $B \equiv (\mathcal{M} - \beta) w$ とおく。 w を ϕ_r で展開して $w = \sum_r C_r \phi_r$, しかし, w と ϕ_r との直交性により

$$r = 1, 2, \dots, s \text{ に対して } C_r = 0. \quad (9.6)$$

従って

$$\begin{aligned}
 (A, B) &= \sum_r \sum_k (C_r (\lambda_r - \alpha) \phi_r, C_k (\lambda_k - \beta) \phi_k) \\
 &= \sum_r |C_r|^2 (\lambda_r - \alpha) (\lambda_r - \beta)
 \end{aligned}$$

一方 λ_r は (α, β) の外にあるから (9.6) より)

$$(A, B) \geq 0.$$

一方 $R = (\mathcal{N} - \rho) w$, $(w, R) = 0$ を用いると

$$\begin{aligned}
 (A, B) &= (\{(\mathcal{N} - \rho) + (\rho - \alpha)\} w, \{(\mathcal{N} - \rho) + (\rho - \beta)\} w) \\
 &= (R, R) + (\rho - \alpha) (\rho - \beta) \geq 0
 \end{aligned}$$

$$\therefore \varepsilon^2 \geq (\rho - \alpha) (\beta - \rho) \quad (9.7)$$

(9.7) で $\alpha = \lambda$ または $\beta = \lambda$ とおけば (9.5) を得る。

(証明終り)

Kato の定理の応用例を考えてみよう。格子振動に於る isolated impurity の場合は、例えば mass を軽くした場合には、もとの最大振動数 ω_L は $\omega'_L (> \omega_L)$ となる。これを λ とおくと、この λ を調べる場合に、定理を用い得る。§ 1.での議論により、固有方程式は次の形になる。

$$\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline B^+ & C \end{array} \right) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (9.8)$$

(A が impurity に関係した部分 (matrix) である。) (9.8) により

$$A u = \rho u, \quad w = \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix},$$

$\beta = \lambda$ の場合を用いる。

$$\lambda \leq \rho + \frac{\varepsilon^2}{\rho - \alpha} \quad \text{で} \quad \alpha = \omega_L^2 \quad \text{を代入する。}$$

これにより λ の上限が求められ、逆に $\alpha = \lambda$ の場合を用いると、 λ の下限を求め得る。