

ランダム系のクラスター展開

阪大・教養 植山 宏

(10月10日受理)

§ 1.

ランダム系を一般的に取扱う方法として、グリーン函数のダイアグラム展開^{1), 5)}が有力視されて来た。しかし、この方法では、高次のダイアグラムを集めるのが困難な点²⁾と、簡単なダイアグラムを集めただけでは奇妙な特異性が残る点³⁾と二つの障壁がある。

ここでは、Kubo の Generalized Cumulant Expansion の方法がランダム系の研究に有力である事を示す。格子振動を問題にする場合と、電子状態を問題にする場合とがあるが、ここでは混晶の⁵⁾電子的な状態密度を対象とする。

モデルとしては、Yonezawa - Matsubara と同じものを用いる。従って、系のハミルトニアンは次のようになる。

$$H = H_0 + H_1 \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$\left. \begin{aligned} H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_j W_A(r-R_j) \\ H_1 &= \sum_j \rho_j V(r-R_j) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

$$V(r-R_j) \equiv V_j \equiv W_B(r-R_j) - W_A(r-R_j)$$

ここに $\{\rho_j\}$ が系のランダムネスを特徴づける。ここでは、

$$\left. \begin{aligned} \langle \rho_j^n \rangle &= C \quad (n \geq 1) \\ \langle \rho_{j_1} \dots \rho_{j_n} \rangle_c &= 0 \quad \text{unless } j_1 = j_2 = \dots = j_n \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

なるものとする。

§ 2.

さて、系の状態密度は次のように書ける。

$$\begin{aligned} D(E) &\equiv \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}) \\ &= \frac{1}{\pi} R e \int_0^{\infty} dt e^{i t (E + i \epsilon)} T_r e^{-i t H_0} \exp_+ \left(i \int_0^t H_1(t') dt' \right) \end{aligned} \quad (4)$$

ここに $\exp_+$ は time ordered exponential であり、

$$H_1(t) \equiv e^{i t H_0} H_1 e^{-i t H_0}$$

系のランダムネスによって平均された状態密度 $\langle D(E) \rangle$ を求める為には、次のモーメントが求まればよい事が分る。

$$M(t) \equiv \langle \exp_+ \left(i \int_0^t H_1(t') dt' \right) \rangle \quad (5)$$

ここで、Generalized Cumulant Expansion Theorem を用いると

$$\begin{aligned} M(t) &= \exp_+ \langle \exp_+ \left(i \int_0^t H_1(t') dt' \right) - 1 \rangle_c \\ &= \exp_+ \sum_{n=1}^{\infty} i^n \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \langle H_1(t_1) \cdots H_1(t_n) \rangle_c \end{aligned}$$

となる。この右辺のキュムラントは、(2) 式及び (3) の第二式を用いて書直せば、

$$\begin{aligned} \langle \cdots \rangle_c &= \sum_{j_1} \cdots \sum_{j_n} \langle \rho_{j_1} \cdots \rho_{j_n} \rangle_c V_{j_1}(t_1) \cdots V_{j_n}(t_n) \\ &= \sum_j \langle \rho_j^n \rangle_c V_j(t_1) \cdots V_j(t_n) \end{aligned}$$

となるが、ここでキュムラントの表式 $P_n(c)$ を使わないで、再びモーメントの表現に戻す。

$$M(t) = \exp_+ \sum_i \langle \exp_+ \left(i \int_0^t \rho_j V_i(t') dt' \right) - 1 \rangle_c$$

$$= \Pi_+ \langle \exp_+ (i \int_0^t \rho_i V_i(t') dt') \rangle$$

このモーメントを展開して、(3)の第一式を用いれば、結局

$$M(t) = \exp_{+L} \sum_j C \{ \exp_+ (i \int_0^t V_i(t') dt') - 1 \} \quad (6)$$

ここに、 $\exp_L$ は leveled exponential である。(6)の素直な展開は、クラスター展開であり、この場合には同時に C の巾展開になっている。

今、グリーン函数を導入する。

$$G(E) = \frac{1}{E - H_0 - H_1} \quad (7)$$

但し、分母の $+i\epsilon$ は省略した。すると(6)式の展開より、

$$\langle G(E) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C^n G(E)^{(n)} \quad (8)^*$$

という形に求まる。 $G(E)^{(n)}$ は n 次クラスターよりの寄与を表す。最初の数項を書いてみれば

$$\begin{aligned} G(E)^{(0)} &= g \\ G(E)^{(1)} &= \sum_j (G_j - g) \\ G(E)^{(2)} &= \sum_{(ij)} (G_{ij} - G_i - G_j + g) \\ G(E)^{(3)} &= \sum_{(ij\ell)} (G_{ij\ell} - G_{ij} - G_{j\ell} - G_{i\ell} + G_i + G_j + G_{\ell} - g) \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (9)$$

但し、

$$g = 1 / (E - H_0)$$

$$G_i = 1 / (E - H_0 - V_i)$$

植山 宏

$$G_{ij} = 1 / (E - H_0 - V_i - V_j) \dots \dots \dots (10)$$

ダイアグラム法との関連を見る為に、次のようにセルフ・エネルギーを導入する。

$$\Sigma_k = 1 / g_k - 1 / \langle G(E) \rangle_{kk} \dots \dots \dots (11)$$

(8) 式を代入すると、 Σ_k も亦、 C の巾級数に展開出来る事が分る。

$$\Sigma_k = \sum_{n=1}^{\infty} C^n \Sigma_k^{(n)} \dots \dots \dots (12)$$

但し

$$\begin{aligned} \Sigma_k^{(1)} &= G_k^{(1)} / g_k^2 \\ \Sigma_k^{(2)} &= G_k^{(2)} / g_k^2 - (G_k^{(1)} / g_k)^2 / g_k \\ \Sigma_k^{(3)} &= G_k^{(3)} / g_k^2 - 2 G_k^{(1)} G_k^{(2)} / g_k^3 - (G_k^{(1)} / g_k)^3 / g_k \\ &\dots \dots \dots \end{aligned} \dots \dots \dots (13)$$

十分に低濃度領域では (12) の最初の数項で近似する事も有効であろう。第一及び第二項は、Langer¹⁾ によって議論されたものである。また、(8) 式で最初の何項かをとった近似は、Chō — Toyozawa⁶⁾ によって特別に簡単化したモデルについて議論されたクラスターに対応するものと考えられる。

脚注 なお、この低濃度展開については、別の観点より Seitz — Turnbull 編 Solid State Physics の別巻 (1963) p.198 に論じられている。

§ 3.

もう少し、高い濃度の所を議論する為には、非摂動系として一様に混った系をとるのが有利であろう。この時は

$$\begin{aligned} H &= \widetilde{H}_0 + \widetilde{H}_1 \\ \widetilde{H}_0 &= H_0 + \sum_j V_j \\ \widetilde{H}_1 &= \sum_j (\rho_i - \dots) V_i \end{aligned} \quad (14)$$

と分解して、§ 2 と同じ操作を行えば、

$$\begin{aligned} \langle G(E) \rangle &= i \int_0^\infty dt e^{it(E-\widetilde{H}_0)} \Pi_+ \left\{ (1-C) \exp_+ \left(-ci \int_0^t V_i(t') dt' \right) \right. \\ &\quad \left. + c \exp_+ \left((1-c) i \int_0^t V_i(t') dt' \right) \right\} \\ &= i \int_0^\infty dt e^{it(E-\widetilde{H}_0)} \exp_{+L} \sum_i \alpha \left\{ (1-c) \exp_+ \left[-ci \int_0^t V_i(t') dt' \right] \right. \\ &\quad \left. + c \exp_+ \left[(1-c) i \int_0^t V_i(t') dt' \right] - 1 \right\} \dots (15) \end{aligned}$$

となる。但し、第二式では便宜上パラメーター α を導入したが、これは1と置かねばならない。

(15) 式を展開すれば、

$$\langle G(E) \rangle = \sum_{n=0}^\infty \alpha^n \widetilde{G}(E)^{(n)} \quad (16)$$

という形に求まる。但し、

$$\widetilde{G}(E)^{(0)} = \widetilde{g} \equiv 1 / (E - \widetilde{H}_0)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{G}(E)^{(1)} &= \sum_j \left\{ \frac{(1-c)}{E - \widetilde{H}_0 + c V_i} + \frac{c}{E - \widetilde{H}_0 - (1-c) V_i} - \widetilde{g} \right\} \\ &\dots \dots \dots (17) \end{aligned}$$

この場合には、展開パラメーター α は意味を持たないが、 $\tilde{G}(E)^{(n)}$ はやはり n 次のクラスターの寄与を表す。従って、大きなクラスターに因く、スペクトルの微細構造を問題にしなければ、最初の数項で近似してよいと思われる。

§ 4.

前節の結果をイオン混晶の自己主張型⁷⁾＝融合型の問題に応用してみる。この問題はすでに Onodera - Toyozawa (以下 OT と略記) によって取扱われて居り、また、参考文献も豊富に載せられている。

彼らは、ハミルトニアン

$$H = \sum_n \epsilon_n a_n^* a_n + \sum_{m,n} t_{mn} a_m^* a_n$$

より出発したが、これは我々の場合には、ポテンシャル V が大きさ $\Delta = \epsilon_B - \epsilon_A$ のデルタ函数である場合に対応する。 $\tilde{G}^{(1)}$ まで取った近似を、彼らの記法で書けば、

$$\begin{aligned} \langle G(E) \rangle_k &= \frac{c_A}{E - (t_k + c_A \epsilon_A + c_B \epsilon_B) + c_B \Delta} + \frac{c_B}{E - (t_k + c_A \epsilon_A + c_B \epsilon_B) - c_A \Delta} \\ &= \frac{c_A}{E - t_k - \epsilon_A} + \frac{c_B}{E - t_k - \epsilon_B} \end{aligned} \quad (18)$$

となる。

(18) 式は OT に比して極めて簡単であるが、彼らがセルフ・エネルギーの形を推定するのに用いた次の諸点はすべて満足している。即ち

- (i) $A \leftrightarrow B$ の置換について対称
- (ii) $t_k \rightarrow 0$, 及び $\Delta \rightarrow 0$ で共に正確な表式になる。
- (iii) セルフ・エネルギーは低濃度では正確な式となる。

更に比較の為、セルフ・エネルギーの形で展開式を書いてみると、

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_k(E) &= g_k^{-1} - \langle G_k(E) \rangle^{-1} \\ &= c_B c_A \Delta^2 g_k - c_B c_A (c_B - c_A) \Delta^3 g_k^2 + c_B c_A (1 - 4 c_B c_A) \Delta^4 g_k^3 \\ &\quad + O(\Delta^5) \end{aligned}$$

これを 0T の (2-12) 式と比較すると, Δ^3 の項まで一致しており, 2 次のクラスターの効果が出て来ると云われる Δ^4 の項からわずかに違って来る。さて, (18) 式より状態密度を求めると,

$$D(E) = c_A \rho(E - \epsilon_A) + c_B \rho(E - \epsilon_B) \quad \dots\dots\dots (19)$$

となる。但し, $\rho(E)$ は純粋な系の状態密度である。今, $\rho(E)$ がバンド巾 T を持つとすれば, 混晶は $\Delta/T > 1$ の時に自己主張型になり, $\Delta/T < 1$ の時に融合型になるという簡単な結果になる。

もう少し進んだ結果については別の機会に議論したい。

討論及び激励をされた西山, 松原両先生及び福島氏に感謝します。

文 献

- 1) S.F. Edwards, Phil. Mag. 3 ('58) 1020
J. S. Langer, J. Math. Phys. 2 ('61) 584
- 2) S.F. Edwards. Proc. Phys. Soc. 85 ('65) 1
- 3) P. L. Leath and B. Goodman, Phys. Rev. 148 ('66) 968
- 4) R. Kubo J. Phys, Soc. Japan 17 ('62) 1100
- 5) F. Yonezawa and T. Matsubara Prog. Theor. Phys. 35 ('66) 357
- 6) K. Chô[^] and Y. Toyozawa 統計力学国際会議講演 ('68)
- 7) Y. Onodera and Y. Toyozawa J. Phys. Soc. Japan 24 ('68) 341