

Kronig-Penny モデルにおける Special Energy I

和田 宏 (北大理)

(10月1日受理)

1 Introduction

無秩序多原子鎖の格子振動において、 $\omega = (\frac{2K}{m_0})^{\frac{1}{2}} \sin \pi x$ (K は格子定数で m_0 は系の一番軽い原子の質量、 x は有理数) で与えられる "special frequency" が存在し、ここで振動数スペクトルの密度が、二番目に軽い原子の質量が十分大きければ零になることが Matsuda 及び Hori によつて証明された。^{1) 2) 3)} ここでは、格子振動とよく似た性質をもつ "Kronig-Penny model" において、ポテンシャルが同一で格子間隔が基本間隔の整数倍で無秩序に変るとき、 $k = \frac{m\pi}{n\ell}$ ($k = \sqrt{E}$, m, n は互いに素な整数) のところのエネルギー・スペクトルの密度がポテンシャルの深さがある臨界値より大きいとやはり零となり、"special energy" が現われることを、Hori-Matsuda の定理⁴⁾ を用いて示す。

2 Special Energy の存在

系の Schrödinger equation は

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \sum_j V\delta(x-x_j)\psi(x) = k^2\psi(x). \quad (1)$$

ここで x_j は j 番目の potential の位置座標で $-V$ は potential の強さ、 ℓ を基本間隔とすると $x_{j+1} - x_j = n_j\ell$ (n_j は正の整数値をとる random variable) である。

potential j と $j+1$ の間の波動関数を ψ_j とすると、

$$\begin{aligned} \psi_j &= A_j e^{ik(x-x_j)} + B_j e^{-ik(x-x_j)}, \\ \psi_{j+1} &= A_{j+1} e^{ik(x-x_{j+1})} + B_{j+1} e^{-ik(x-x_{j+1})}. \end{aligned} \quad (2)$$

(1)式を使うと、 (A_j, B_j) と (A_{j+1}, B_{j+1}) の関係は

和田 宏

$$\begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 + i \frac{V}{2k}) \exp(ikn_j \ell) & i \frac{V}{2k} \exp(-ikn_j \ell) \\ -i \frac{V}{2k} \exp(ikn_j \ell) & (1 - i \frac{V}{2k}) \exp(-ikn_j \ell) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix}$$

で与えられることがわかる。

今 $k = \frac{m}{n} \frac{\pi}{\ell}$ (m, n は互いに素な整数) ととり、 $\frac{A_j}{B_j} = z_j$ なる量を定義する。 $n_j > n$ なる cell は、 z_j の変化に着目する限り、 $0 < n_j \leq n$ なる cell の 1 つと同一視することができる。したがって、独立な構成系としては次の n 種を考えればよい。

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \ell & \ell & \ell & \ell \\ \hline -V & -V & -V & -V \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 2\ell & 2\ell & 2\ell \\ \hline -V & -V & -V \\ \hline \end{array} \quad \cdots \quad \begin{array}{|c|c|} \hline n\ell & n\ell \\ \hline -V & -V \\ \hline \end{array} \quad (4)$$

これらの構成系の transfer matrix を $\{Q^{(p)}\}$ ($p=1, 2, \dots, n$) とすれば

$$Q^{(p)} = \begin{bmatrix} (1 + i \frac{V}{2k}) \exp(ikp\ell) & i \frac{V}{2k} \exp(-ikp\ell) \\ -i \frac{V}{2k} \exp(ikp\ell) & (1 - i \frac{V}{2k}) \exp(-ikp\ell) \end{bmatrix} \quad (5)$$

$Q^{(p)}$ の固有値方程式は

$$\theta^2 - 2\theta \left(\cos kp\ell - \frac{V}{2k} \sin kp\ell \right) + 1 = 0 \quad (6)$$

$Q^{(p)}$ で記述される構成系において k が band gap である条件は、 $Q^{(p)}$ が双曲線か放物線であること、すなわち固有値 θ が real であることである：

$$\left(\cos kp\ell - \frac{V}{2k} \sin kp\ell \right)^2 \geq 1 \quad (7)$$

行列 $Q^{(p)}$ の固有ベクトルの成分比である sink point と source point $z_{\pm}^{(p)}$ は (固有値が実ならば $|z_{\pm}^{(p)}| = 1$) 式(5), (6)を使つて、

$$z_{\pm}^{(p)} = - \frac{\theta_{\pm}^{(p)} - \exp(-ikp\ell)}{\theta_{\pm}^{(p)} - \exp(ikp\ell)}$$

$$= - \frac{[(\theta_{\pm}^{(p)})^2 - 2\theta_{\pm}^{(p)} \cos kpl + \cos 2kpl] + i [2\theta_{\pm}^{(p)} \sin kpl - \sin 2kpl]}{(\theta_{\pm}^{(p)})^2 - 2 \cos kpl \theta_{\pm}^{(p)} + 1} \quad (8)$$

従つて、 $Z_{\pm}^{(p)} = e^{i\delta_{\pm}^{(p)}}$ で定義される limit phase $\delta_{\pm}^{(p)}$ に対しては、

$$\cos \delta_{\pm}^{(p)} = \frac{-1 - 2\theta_{\pm}^{(p)} \frac{V}{2k} \sin kpl + \cos 2kpl}{\frac{V}{2k} \sin kpl \times 2\theta_{\pm}^{(p)}}.$$

ゆえに

$$\cos \frac{\delta_{\pm}^{(p)}}{2} = \left(\frac{\sin kpl}{-\theta_{\pm}^{(p)} \frac{V}{k}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (9)$$

(6)式によつて、 $kpl \rightarrow kpl + \pi$ に変えると、 $\sin kpl$ と同時に $\theta_{\pm}^{(p)}$ が符号を変えるので $\cos \frac{\delta_{\pm}^{(p)}}{2}$ は不変である。したがつて、 $\delta_{\pm}$ を考えるかぎり、角 kpl を区間 $0 < \alpha^{(p)} \equiv kpl - n\pi \leq \pi$ の中に reduce することが可能である。

この約束のもとでは(7)式は

$$\cos \alpha^{(p)} - \frac{V}{2k} \sin \alpha^{(p)} + 1 \leq 0 \quad (10)$$

となる。

最小の $\alpha^{(p)}$ ($=\alpha_{\min}$) に対して

$$\cos \alpha_{\min} - \frac{V}{2k} \sin \alpha_{\min} + 1 = 0 \quad (11)$$

が成立すれば、他の $\alpha^{(p)}$ は(10)式を満足するので、(11)式はすべての $\{Q^{(p)}\}$ の固有値が実であるための十分条件である。

さらに、 k によつて決まる $\alpha_{\min}$ に対して、

$$\cos \alpha_{\min} - \frac{V^{(Q)}(k)}{2k} \sin \alpha_{\min} + 1 = 0 \quad (12)$$

を満足する $V^{(Q)}(k)$ よりも大なる任意の V に対して、 k はすべての構成系に共通な gap に属している。

Hori-Matsuda の定理を使うためには、 $V \geq V^{(Q)}(k)$ に対して、source-phase interval $\{\delta_{+}^{(p)}\}$ と sink-phase interval $\{\delta_{-}^{(p)}\}$ とが互に重ならないことを示せばよい。そのために、 $\alpha^{(p)}$ を連続変数 α と考え、 $V \geq V^{(Q)}(k)$ 、 $\alpha \geq \alpha_{\min}$ における(9)式の右辺の2乗のふるまいをみる。

$V = V^{(Q)}(k)$ 、 $\alpha_{\min}$ のとき $\delta_{\pm}^{\min}$ は一致し、

和田 宏

$$\delta_{\pm}^{\min} = 2 \cos^{-1} \left(\frac{4k^2}{4k^2 + V^{(Q)}(k)^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

$\alpha_{\min}$ のときの V に関する微係数は

$$\frac{d}{dV} \left(\frac{k \sin \alpha_{\min}}{-\theta_{\pm} V} \right) = k \sin \alpha_{\min} \frac{\theta_{\pm} + \frac{d\theta_{\pm}}{dV}}{(\theta_{\pm} V)^2} \quad (14)$$

但し $\theta_{\pm}$ は Q の固有値

$$\theta_{\pm} = \cos \alpha_{\min} - \frac{V}{2k} \sin \alpha_{\min} \pm \sqrt{\left(\cos \alpha_{\min} - \frac{V}{2k} \sin \alpha_{\min} \right)^2 - 1}$$

である (定義により絶対値の大きい方を θ_{-} としてある)

$\cos \alpha_{\min} - \frac{V}{2K} \sin \alpha_{\min} = A < -1$ なので

$$\theta_{\pm} + V \frac{d\theta_{\pm}}{dV} = (2A - \cos \alpha) \pm \frac{(A^2 - 1) + A(A - \cos \alpha)}{\sqrt{A^2 - 1}}.$$

故に (14) は下の符号に対しては常に負となり、上の符号に対しては、はじめ正で $-\frac{V}{k} = \tan \alpha_{\min}$ で符号をかえる。 $V \rightarrow +\infty$ になるにつれて

$$\delta_{\pm}^{\min} \longrightarrow \begin{cases} -\pi \\ +\pi \end{cases}$$

したがって、 $V = V^{(Q)}(k)$ で $\delta_{\pm}^{\min}$ は一致し、 V の増加と共に単位円周を反対方向に動き、 $\delta_{-}^{\min}$ は $+\pi$ に $\delta_{+}^{\min}$ は $-\pi$ に近づくことになる。(Fig. 1)。

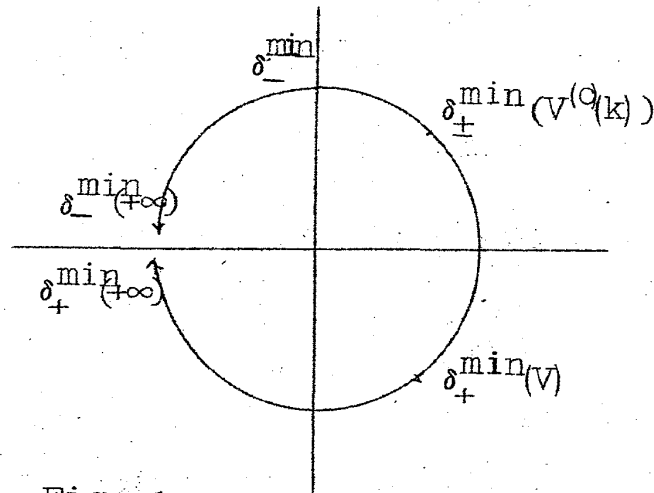


Fig. 1.

次に与えられた $V \geq V^{(Q)}(k)$ に対して α に関する変化を調べる：

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{k \sin \alpha}{-\theta_{\pm} V} \right) = -\frac{k}{V} \frac{\theta_{\pm} \cos \alpha - \frac{\partial \theta_{\pm}}{\partial \alpha} \sin \alpha}{(\theta_{\pm})^2} \quad (15)$$

ところが

$$\theta_{\pm} \cos \alpha - \frac{\partial \theta_{\pm}}{\partial \alpha} \sin \alpha = 1 \mp \frac{\frac{V}{2k} \sin \alpha}{\sqrt{A^2 - 1}}$$

であるから、(15) 式は下の符号に対しては常に負、上の符号に対しては、はじめ正であるが $-\frac{V}{k} = \tan \alpha$ で符号を変える。 $\alpha \rightarrow \pi$ になるにつれて $\theta_{\pm} \rightarrow -1$, 従つて $\delta_{+} \rightarrow -\pi$, $\delta_{-} \rightarrow +\pi$ になる。

以上によつて、 $V \geq V^{(c)}(k)$, $\alpha > \alpha_{\min}$ に対しては $\delta_{-}^{\min}$, $\delta_{+}^{\min}$ は単位円周上はなれて位置しており、 α の変化につれて δ_{-} , δ_{+} はますます離れる方向に動いてゆくことがわかる。(Fig. 2)

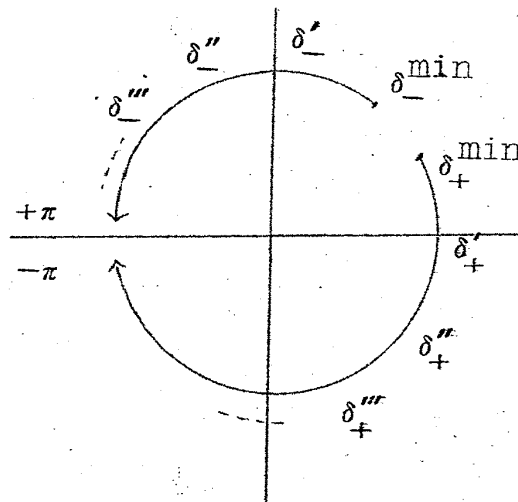


Fig. 2 矢印方向に α は増加する

したがつて、sink-phase interval $\{\delta_{-}^{(p)}\}$ と source-phase interval $\{\delta_{+}^{(p)}\}$ とはかさなる spectral density は $k = \frac{m}{n} \frac{\pi}{\ell}$ において零となることが結論できる。

3 Critical Potential と Special Energy の分布。

上述のように、 $\frac{m}{n} \frac{\pi}{\ell}$ という形をもつ k の各値に対して臨界値 $V^{(c)}(k)$ がきまり $V \geq V^{(c)}$ なる V に対してその k は special energy を与える。 $k\ell$ を $0 < \alpha^{(p)}$

和田 宏

$\leq \pi$ に reduce したときの最小値 $\alpha_{\min}(k)$ は常に $\frac{\pi}{n}$ で与えられる:

$$\alpha_{\min}\left(\frac{m}{n} \frac{\pi}{\ell}\right) = \frac{\pi}{n} \quad (16)$$

従つて critical potential は (12) より

$$\cos \alpha_{\min} - \frac{V^{(d)}(k)}{2k} \sin \alpha_{\min} = -1 \quad (12)$$

で決定される。即ち

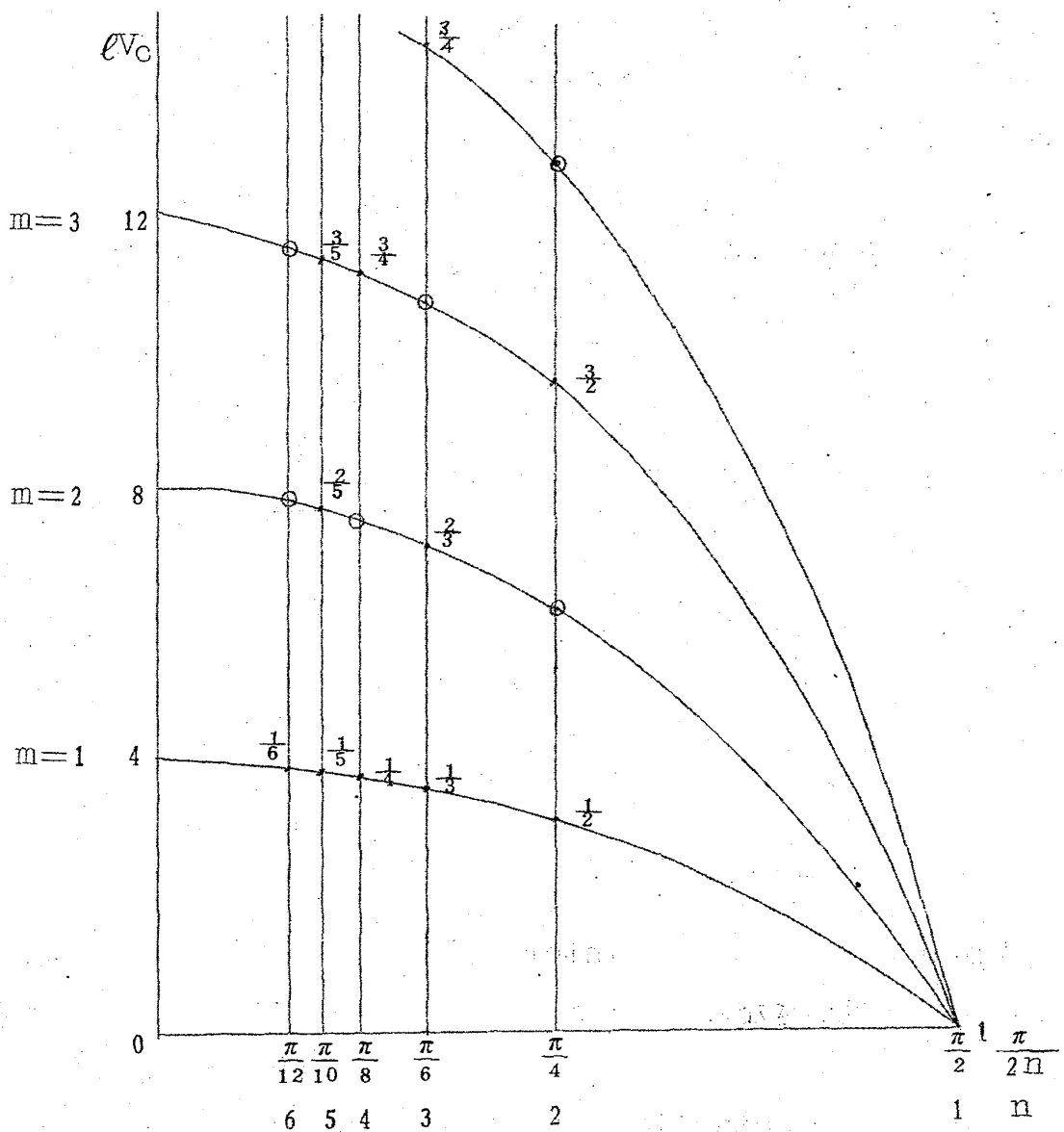


Fig.3 白丸はreducible な有理数に対応し、従つて新しいspecial energy を与えない

$$V^{(0)}(k) = V^{(0)}\left(\frac{m}{n} \frac{\pi}{\ell}\right) \\ = \frac{4m}{\ell} \frac{\pi}{2n} \cot \frac{\pi}{2n} \quad (17)$$

$V^{(0)}(k)$ を m と n の関数として描いたのが Fig. 3 である。

同位原子格子における special frequency の出現の仕方と比べて、この場合は非常に規則的な現われ方をしている。すなわち、 m が小さい程、また m の等しいときは n が小さい程浅い potential で special energy となる。上の計算では負の potential $-V$ を仮定したが正のポテンシャル $+V$ を用いても formal には全く同じ結果が得られる。

4 Final Remark

2 原子 Kronig-Penny モデル、即ちポテンシャルの間隔が一定で、2 種類のポテンシャル $-V_A$ と $-V_B$ が random に並んでいる場合にも、special energy が存在し、Agacy 及び Borland⁵⁾ が計算した 2 原子 Kronig-Penny モデルのスペクトルに現われている谷間はまさにこれらの special energy に対応することが同様に示されるが、これについての詳細は続報 II にゆずる。

最後に、絶えず御指導を下さり励げまして下さった堀先生に深謝致します。

文 献

- 1) H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 31 (1964) 161
- 2) J. Hori, Prog. Theor. Phys. 32 (1964) 471
- 3) H. Matsuda and K. Okada, Prog. Theor. Phys. (in press)
- 4) J. Hori and H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 32 (1964) 183
- 5) R.L. Agacy and R.E. Borland, Proc. Phys. Soc. 84 (1964) 1017