数理解析研究所講究録
第174巻 1973年 108-125

1次元不規則系の統計物理

京大 理 生物物理 石 井 一 成

§1. はじめに

確率論と密接な関係をもつ物理の理論の1つに統計力学の集団理論([1])があることはよく知られている。ここでは、まだそれほど知られていない(少くとも数学者には)と思われる不規則系の統計物理([2])について紹介しよう。これは液体金属や不純物を含んだ結晶中の電子やフォノン、ガラス中のフォノンなどの性質に関する問題である。規則的、不規則的というのは系の構造に空間的周期性があるか、ないかに応じている。

例をとって説明しよう。同じ強さのバネで結ばれた原子が作る鎖の格子振動を考えよう。運動方程式は

$$m_n\frac{d^2}{dt^2}u_n=K(u_{n+1}-2u_n+u_{n-1}),\ (n=1,2,\cdots,N) \qquad (1)$$

である。ここで、u_n は n 番目の原子の平衡位置からの変位

、m_nはn番目の原子の質量である。Nは鎖に含まれる原子の個数で、両端での境界条件がu_0、u_{N+1}を与える。この力学系は質量m_nの系列$\{m_n; n=1,2,\cdots,N\}$によって構造が決定される。格子鎖が質量m、Mの2種類の原子から成る場合を考えてみよう。$\{m_n\}$が例えば

$$m_n = \begin{cases} m & (n: \text{odd}) \\ M & (n: \text{even}) \end{cases} \tag{2}$$

で与えられる系は、その構造$\{m_n\}$に周期2の空間的周期性がある訳で、規則系と呼ばれる。このような周期性は、固体論において完全結晶として記述される模型には常に伴われており，物理的性質を研究するときの有力な足掛りを与えてきた。例えば、(1)に付随する固有値問題は、ωを固有振動数とすると

$$-m_n \omega^2 u_n = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}),\ (n=1,2,\cdots,N) \tag{3}$$

であるが、$\{m_n\}$が(2)で与えられる周期系で、周期的境界条件

$$u_0 = u_{2N}\ ,\ u_{2N+1} = u_1 \tag{4}$$

が課される場合には

$$u_n = \begin{cases} e_1 \exp(ikm) & (n = 2m-1) \\ e_2 \exp(ikm) & (n = 2m) \end{cases} \tag{5}$$

と置けば、(3)は

$$-m\omega^2 e_1 = K\{-2e_1 + (1+e^{-ik})e_2\}, \tag{6}$$

$$-M\omega^2 e_2 = K\{(1+e^{ik})e_1 - 2e_2\} \tag{7}$$

となり、(4)は

$$k = \frac{2\pi l}{N} \quad (l = 0, 1, 2, \cdots, N-1) \tag{8}$$

を与える。kは波数と呼ばれ、これに応じて(6)、(7)から2つの固有振動数 $\omega_\pm(k)$ が決められる。このときの固有状態は、(5)から分るように、空間的に広つている。ここで考えた解はフォノンという概念の基礎になつているが、(5)のような解が想定できるためには、(2)の形の周期性が不可欠である。

不規則系の例を得るには、例えば(2)の$\{m_n\}$の中で1つのmをMで置換えた$\{m_n\}$を考えればよい。このような構造にはもはや空間的周期性はない。いま考えた例は、(2)で与えられる規則系に不純物が1個入った場合である。もつと一般に、規則系に不純物がn個入った場合も考えられるが、$n \ll N$ の場合は、少数不純物の場合として、かなり一般的な取扱いが

できる([3])。しかし$n\sim N$の場合には、系の性質を調べることは困難になる。このような場合には、実は不純物という考え方がもはや適切でなくなっており、系の構造について巨視的、確率論的な指定がされると考える方がより適切になってくるような物理的状況がある。すなわち、格子鎖はc%のm原子と$(100-c)$%のM原子とから成っているということが試料分析から分っても、いかなる微視的構造$\{m_n\}$をしているかは分らない場合である。このような状況を模型化するために、例えば、$\{m_n\}$が互いに独立な確率変数であって、いずれも値mを確率$c/100$で、値Mを確率$(1-c/100)$で取ると考えることもできる。この考えに立つと、不規則系は様々の微視的構造$\{m_n\}$をもつ標本鎖の集団に確率分布が与えられたものと理解することができる。

以上を一般的に言うと、不規則系は巨視的、確率論的に指定された標本系の集団である。標本系σの力学的構造はそのハミルトニアン$H(\sigma)$で記述される。したがって不規則系はハミルトニアン$H(\sigma)$の確率集団であるとも言える。不規則系の統計物理では、$\{H(\sigma)\}$が与えられたとき、σについて確率1で主張できる(巨視的、熱力学的な)性質を研究するのが課題である。

系の熱力学的性質については、統計力学によれば平衡状態

での性質はハミルトニアンHの固有エネルギーの分布が与えられれば分るようになっている。しかし、熱伝導や電気伝導などの輸送現象は、非平衡状態の統計力学によれば、Hの固有状態の性質にも強く依存する。したがって不規則系の統計物理でも、H(ω)の固有エネルギーの分布や固有状態の性質について、確率1で主張できることを見出すのが基本的である。

不規則系の有力な研究法の1つは、モンテ・カルロ法による計算機実験である（[4]、[5]）。典型的な標本系$\{m_n\}$について調べた結果、1次元同位元素的格子鎖では固有振動数の分布に微細構造が現れ、固有状態は空間的に局在しやすくなることが見出された。これが計算誤差によるものでないことの証明は、解析的な研究によって試みられてきた。固有エネルギーの分布については既に詳しい研究があり、特徴的な性質がかなり理解されるに至っているので（[6]、[7]）、ここでは割愛し、固有状態の局在性に関連した性質について二、三の紹介をする。固有状態について厳密なことが分っているのは、今のところ、簡単な1次元系についてだけである。§2で典型的な模型をいくつか紹介し、§3では指数関数的増大の性質、§4では量子拡散の問題について述べよう（[8]、[9]）。

§2. 簡単な1次元不規則系

模型1．同位元素的不規則格子鎖

運動方程式は(1)，(3)で与えられる。$\{m_n\}$は互いに独立な確率変数で値$m(q)$を確率P_qで取る（$q=0,1,\cdots,r-1$）。

$$0<m\leq m(q)\leq M<\infty\ ,\ (q=0,1,\cdots,r-1)\tag{9}$$

を仮定する。

模型2．強結合1電子模型

Schrödinger方程式

$$i\frac{d}{dt}a_n=\varepsilon_n a_n+V(a_{n+1}+a_{n-1})\ ,\ (n=1,2,\cdots,N)\tag{10}$$

で記述される系で，a_nは第n格子点に電子を見出す確率振巾，ε_nは第n格子点での位置エネルギー，Vは最近接格子点間の重り積分である。$\{\varepsilon_n\}$が互いに独立な確率変数で，値$\varepsilon(q)$を確率P_qで取る（$q=0,1,\cdots,r-1$）。

$$-\varepsilon\leq\varepsilon(q)\leq\varepsilon<\infty\ ,\ (q=0,1,\cdots,r-1)\tag{11}$$

を仮定する。(10)に付随する固有値方程式は，Eを固有エネルギーとすると

$$Ea_n=\varepsilon_n a_n+V(a_{n+1}+a_{n-1})\ ,\ (n=1,2,\cdots,N).\tag{12}$$

模型2a．1次元Lloyd模型

これは、各 ε_n が Cauchy 分布

$$P_{i\delta}(\varepsilon_n)=\frac{1}{\pi}\cdot\frac{\delta}{\varepsilon_n^2+\delta^2}\ ,\quad (-\infty<\varepsilon_n<\infty) \tag{13}$$

をする点だけが、模型2と異なる。

模型3. 1次元不規則合金

Schrödinger 方程式

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\sum_{n=0}^{N}V_n\,\delta(x-nl)\,\psi(x)=E\psi(x)\ ,\quad (0\le x\le Nl) \tag{14}$$

で記述される系で、$\psi(x)$は電子の波動関数、V_nは等間隔lで置かれたδ関数ポテンシャルの強さである。$\{V_n\}$が互いに独立な確率変数で、値$V(q)$を確率P_qで取る$(q=0,1,\cdots,r-1)$。

$$-V\le V(q)\le V<\infty\ ,\quad (q=0,1,\cdots,r-1) \tag{15}$$

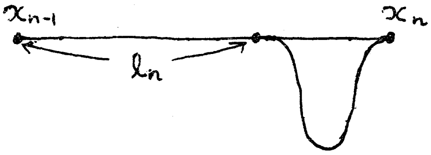
を仮定する。

模型4. 1次元液体金属

Schrödinger 方程式

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\,\psi(x)=E\psi(x)\ ,\quad (0=x_0\le x\le x_N) \tag{16}$$

で記述される系で、ポテンシャル$\{V(x)\,;\,0\le x\le x_N\}$は、互いに独立なポテンシャル区間$\{V(x)\,;\,x_{n-1}\le x<x_n\}$, $(1\le n\le N)$より成る。ポテンシャル区間は長さl_nの零ポテンシャルと、共



通な原子ポテンシャルとから成る。{l_n}が互いに独立な確率変数である。

以上いくつかの模型を導入したが、これらの不規則系の標本集団を具体的に表示するのは、無限系の場合、一般には必ずしも容易ではない。しかし、模型1〜3は、例えば半無限系を考えるときは、[0, 1]区間で標本集団を表示できる。模型1で説明すると、1つの標本鎖は{m_n; $n=1, 2, 3, \cdots$}で指定されるが、これにk進数 $\sigma = 0.q_1 q_2 q_3 \cdots$ を $m_n = m(q_n)$ ($n=1, 2, 3, \cdots$) によって対応させればよい。確率測度μ_1を導入するには、区間$[0.q_1 q_2 \cdots q_n,\ 0.q_1 q_2 \cdots q_{n-1}(q_n+1))$に対し

$$\mu_1([0.q_1 \cdots q_n,\ 0.q_1 \cdots q_{n-1}(q_n+1))) = P_{q_1} P_{q_2} \cdots P_{q_n} \tag{17}$$

と置き、これを拡張すればよい。(17)で考えられている区間は、最初のn個の原子の質量だけが指定されている標本鎖の集合に対応するから、(17)は自然な定義である。

§3. 指数関数的増大

模型2を例にとって、固有状態の局在について考えよう。十分大きいが有限である系の固有状態は(12)から決められる訳であるが、この固有状態が、不規則系の場合、ある格子点に

振巾の最大値をもち，その両側に向って平均として指数関数的に減少している（指数関数的局在）傾向が、モンテ・カルロ法による数値計算の結果に見受けられる。これの解析的理論による説明には難しい問題がまだ残されているので、ここでは、それらの考察で重要な役割を果す、指数関数的増大という性質について紹介しよう。

固有状態は(12)の他に右端，左端での境界条件を満す解であるが、ここでは左端だけで境界条件を満す解の性質を問題にする。この解は伝達行列 $\mathbb{T}_n$ を用いて

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ a_n \end{pmatrix} = \mathbb{T}_n \mathbb{T}_{n-1} \cdots \mathbb{T}_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \end{pmatrix}, \tag{18}$$

$$\mathbb{T}_n = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_n}{V} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

と表すことができる。解(18)の $n \to \infty$ での漸近性質について，規則系，例えば，$\varepsilon_n = 0$，$(n = 1, 2, 3, \cdots)$ の場合には，$|E| < 2V$ ならば

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \left(a_n^2 + a_{n+1}^2 \right) = 0 \tag{20}$$

が容易に分る。ところが，不規則系（模型２）については，次の定理が成立する。

定理１．任意に実エネルギーEを固定すると

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\{a_n^2(E,\sigma)+a_{n+1}^2(E,\sigma)\}=2\gamma(E)>0 \quad \text{for } \mu_1\text{-a.e. } \sigma\in\Sigma. \tag{21}$$

ここで、$a_n(E,\sigma)$ は半無限標本系 σ の場合の、エネルギー E に対する、(12)の解であり，$\gamma(E)$ は ε_n の分布と E から決められる正定数である。

定理 2．μ_1-a.e. $\sigma\in\Sigma$ に対して

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\{a_n^2(E,\sigma)+a_{n+1}^2(E,\sigma)\}=2\gamma(E)>0 \quad \text{for } \mu_2\text{-a.e. } E. \tag{22}$$

ここで、μ_2 は通常のルベーグ測度である。

規則系の性質(20)と比較すると、定理 1，2 の与える漸近性質は不規則系の特徴的な性質であることが分る。これが標題に掲げた指数関数的増大の性質の意味する所である。これらの定理は非可換な確率変数の積の漸近性質に関する Furstenberg の研究（[10]）に基づいて得られた。例えば次のような定理がある。

Furstenberg の定理（[10]）．$\{X_n ; n=1,2,3,\cdots\}$ が互いに独立な確率変数で，$SL(m,R)$ 上に共通の分布 μ をするとき，μ の台を含む最小の部分群 G が $SL(m,R)$ の noncompact 部分群で，G の有限位数の部分群は既約であるならば，$\|X_nX_{n-1}\cdots X_1a\|$ $(a\neq 0)$ は確率 1 で指数関数的に増大する（$n\to\infty$ のとき）。

上の Furstenberg の定理において G に課せられた条件を F-条件と名づけると，G が $SL(2,R)$ の部分群の場合，次の定理が証明できる。

定理3．G が少くとも2つの $SL(2,R)$ の非可換な元をもてば、F-条件は満足される。

定理1，2は定理3によって得られるが，同様な性質が§2の他の模型に対しても得られる。

模型1では、(19)の代りに伝達行列

$$\Pi_n = \begin{pmatrix} 2-\dfrac{m_n\omega^2}{K} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{23}$$

が現れ，$\omega \neq 0$ に対しては

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log\{u_n^2(\omega^2) + u_{n+1}^2(\omega^2)\} = 2\gamma(\omega^2) > 0 \tag{24}$$

の形の指数関数的増大が，確率1で言える。

模型3，4では Schrödinger 方程式(14)又は(16)を

$$\begin{pmatrix} \psi(x_n) \\ \psi'(x_n) \end{pmatrix} = \Pi_n \Pi_{n-1} \cdots \Pi_1 \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix}, \tag{25}$$

$$\Pi_n = \begin{pmatrix} \Phi_n & \Psi_n \\ \Phi_n' & \Psi_n' \end{pmatrix} \tag{26}$$

の形に解くことができる。ここで、Φ_n (Ψ_n) は、初期値 $\Phi_n(x_{n-1}) = 1$, $\Phi'(x_{n-1}) = 0$ ($\Psi(x_{n-1}) = 0$, $\Psi'(x_{n-1}) = 1$) の場合の (14) 又

は(16)の解が，$x=x_n$ で取る値である。この場合には

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\{\psi(x_n)^2+\psi'(x_n)^2\}=2\gamma(E)>0 \tag{27}$$

の形の指数関数的増大が，確率1で言える。

§4. 量子拡散

再び模型2（ただし半無限系）を考えよう。(10)は行列形式で

$$i\frac{d}{dt}a=\mathbb{H}a \tag{28}$$

と書ける。ここに，a は a_n を第 n 成分とする半無限次元ベクトルで，$\mathfrak{H}=\{x;\|x\|_2<\infty\}$ に属する。固定端境界条件（$a_0=0$）の場合，半無限次元行列 $\mathbb{H}$ は

$$\mathbb{H}=\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & V & & \bigcirc \\ V & \varepsilon_2 & V & \\ & V & \varepsilon_3 & V \\ \bigcirc & & V & \ddots \end{pmatrix} \tag{29}$$

の形のJacobi行列である。$t=0$ に電子を確率1で第N格子点に見出す初期状態は

$$a(t=0)=e_N \tag{30}$$

で与えられる。ここで，e_N は，第N成分だけが零と異なり1

である、単位ベクトルである。この初期状態から出発し，時刻tに再び初期格子点Nに電子を見出す確率$|a_N(t)|^2$の，$t\to\infty$での漸近性質を問題にする。この際、2つの場合

$$(\mathrm{I})\quad \overline{\lim_{t\to\infty}}\ |a_N(t)|^2 = 0, \tag{31}$$

$$(\mathrm{II})\quad \overline{\lim_{t\to\infty}}\ |a_N(t)|^2 > 0 \tag{32}$$

が考えられる。(I)を「拡散あり」，(II)を「拡散なし」と定義する。規則系（例えば、$\varepsilon_n = 0$，$n=1,2,3,\cdots$）の場合、「拡散あり」であることは容易に示せる。問題は$\{\varepsilon_n\}$が不規則鎖の場合、「拡散なし」が起るか否かであるが、この問題は未解決である。(32)の代りに

$$\int_0^\infty |a_N(t)|^2 dt = \infty \tag{33}$$

で、「弱い意味での拡散不在」を定義すると，模型2では確率1で、弱い意味で拡散不在であることを示せる。

上の量子拡散の問題が、$\mathbb{H}$のスペクトル分解の性質と密接な関連をもっていることは，次のことからも分る。

$$\mathbb{H} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, d\,\mathbb{E}(\lambda) \tag{34}$$

と$\mathbb{H}$をスペクトル分解すると、時間発展演算子$\mathbb{U}(t)$は

$$\mathbb{U}(t) = e^{-i\mathbb{H}t} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-it\lambda} d\mathbb{E}(\lambda) \tag{35}$$

と分解される。(28)は

$$a(t) = \mathbb{U}(t)\, a(t=0) \tag{36}$$

と解けるから、(30)、(35)を用いると

$$a_N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda t} d\rho_N(\lambda), \tag{37}$$

$$\rho_N(\lambda) = (e_N, \mathbb{E}(\lambda) e_N) \tag{38}$$

を得る。すなわち，確率振巾 $a_N(t)$ はスペクトル測度関数 $\rho_N(\lambda)$ の特性関数である。スペクトルの性質から，漸近的性質(32)を言えるのは、今のところ，e_Nが離散的成分をもつ場合に限られている。e_N が特異連続的成分をもつ場合、(31)、(32)のいずれが起るかは、まだ分っていないのである。

$\mathbb{H}$ のリゾルベント $\mathbb{G}(E)$ は，(34)に応じて

$$\mathbb{G}(E) = \frac{1}{E - \mathbb{H}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{E-\lambda} d\mathbb{E}(\lambda), \quad (E = E' + iE'',\ E'' \neq 0) \tag{39}$$

と分解されるが、これについて次の定理が証明される。

定理4．$\{Y_n(E),\ n=1,2,3,\cdots\}$ を、定差方程式

$$E Y_n = \varepsilon_n Y_n + V(Y_{n+1} + Y_{n-1}), \quad (n=1,2,3,\cdots) \tag{40}$$

の，初期条件

$$Y_0 = 0\ ,\ \ Y_1 = 1 \tag{41}$$

を満す解としたとき，

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log\{Y_n^2(E') + Y_{n+1}^2(E')\} = 2\gamma(E') > 0 \tag{42}$$

であれば，$G_{nm}(E'-i0) \equiv \lim_{E''\to 0-} G_{nm}(E'+iE'')$，$(n, m = 1, 2, 3, \cdots)$
が存在し

$$\text{i) } \mathrm{Im}\ G_{nm}(E'-i0) = 0\ , \tag{43}$$

$$\text{ii) } |G_{nm}(E'-i0)| \leqq O\left(e^{-\gamma(E')|n-m|}\right),\ (|n-m|\to\infty)\ , \tag{44}$$

不規則系では指数関数的増大の性質が確率 1 で成立することを利用すると，定理 4 より

定理 5．模型 1，2（半無限系）のスペクトルは確率 1 で特異である。

が証明される。さらに，伝達行列を用いて調べると，一般に

定理 6．模型 1，2（半無限系）のスペクトルは連続無限である。

を証明することもできる。

§5. おわりに

時間の都合もあって、限られた問題について、簡単な結果だけの紹介になってしまった。興味をお持ちの方は文末の文献をご覧いただきたい。不規則系の統計物理一般については[2]、固有値の分布については[6]、[7]、固有状態の局在と輸送現象については[8]、[9]、[10]を見ていただきたい。

なお、日本においては、「格子振動グループ」と略称される物理学者の集りが、とかくすると白眼視されがちな雰囲気の中で、統計力学の基礎的な問題を、格子振動子系などの簡単な模型の厳密な理論研究によって解明しようと、研究してきた。その結果は[12]のように3冊の報告書として結実している。あわせてご覧いただきたい。

ここに紹介したのは、京大・基研の松田博嗣教授と筆者との共同研究の結果であるが、私たちは1969年に数研で開かれた「ランダム行列の研究会」に多くを負っていることを告白し、感謝したい。先回の研究会では、私たちは数学者の方々からFurstenbergの研究を紹介され少なからず啓発されたのであるが、今回の報告が、何らかの形で数学者の方々が不規則系の統計物理に興味を持たれ、独自の寄与をしていただく機縁ともなればと願うしだいである。

文献

[1] D. Ruelle, Statistical Mechanics (Benjamin, New York, 1969).

[2] 松田博嗣, 科学 39 (1969), 462

[3] A. A. Maradudin, E. W. Montroll and G. H. Weiss, Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation (Academic Press, New York, 1963)

[4] P. Dean, Proc. Roy. Soc. 254 (1960), 507.

P. Dean and M. D. Bacon, Proc. Phys. Soc. 81 (1963), 642.

[5] D. N. Payton and W. M. Visscher, Phys. Rev. 154 (1967), 802; 156 (1967), 1032.

[6] J. Hori, Spectral Properties of Disordered Chain and Lattices (Pergamon Press, Oxford, 1968).

[7] B. I. Halperin, Adv. Chem. Phys. 13 (1967), 123.

[8] H. Matsuda and K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 45 (1970), 56.

[9] K. Ishii, Thesis submitted to Kyoto University (1971), to be published in Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 51 (1972).

[10] H. Furstenberg, Trans. Amer. Math. Soc. 108 (1963), 3.

[11] A. Casher and J. L. Lebowitz, J. Math. Phys. 12 (1971), 1686.

[12] Lattice Vibration of Imperfect Crystals, Suppl. Prog. Theor. Phys. No. 23, Kyoto (1962),

Contribution to the Theory of Linear Chain, Suppl. Prog. Theor. Phys. No. 36, Kyoto (1966),

Some Topics in the Theory of Lattice Dynamics, Suppl. Prog. Theor. Phys. No. 45, Kyoto (1970).