ギブス点過程に関するランダムシュレディンガー作用素の状態密度

京都大学大学院 人間・環境学研究科 共生人間学専攻
中川雄太 (Yuta NAKAGAWA)

概要

空間内にランダムに点を配置し、各点を中心として一点当たりのポテンシャルを置いてできるポテンシャルに関するシュレディンガー作用素を考える。累積状態密度関数 $N(\lambda)$ は、単位体積当たりの λ 以下の固有値の個数を意味する。本講演では、点同士に相互作用があるようなランダムな点の配置 (ギブス点過程) における $N(\lambda)$ $(\lambda \downarrow -\infty)$ の漸近挙動が、相互作用の決め方によって大きく変わることを見る。特に、相互作用が無い場合 (ポアソン点過程) と比較する。

1 導入

ガラスに代表されるような結晶構造を持たない物質をアモルファス物質という。アモルファス物質はその構造ゆえに金属結晶とは異なる電子的性質を持つ。例えば、アモルファス物質特有の性質として、状態密度が基底エネルギー付近で希薄になるになる現象が知られている。アモルファス物質の量子力学的モデルとして $L^2(\mathbb{R}^d, dx)$ 上のランダムシュレディンガー作用素

$$H_\Gamma = -\Delta + V_\Gamma, \quad V_\Gamma(x) = \sum_{y \in \Gamma} u(x-y) \tag{1}$$

を考える。ここで、Δ はラプラシアン、Γ は $\mathbb{R}^d$ 内のランダムな点の配置で点同士に相互作用が無いようなもの (ポアソン点過程という) とし、u は $\mathbb{R}^d$ 上のコンパクトな台を持つ実数値連続関数とする。関数 u はアモルファス物質を構成する原子 (または分子)1 つ当たりのポテンシャルを表している。

シュレディンガー作用素 (1) の累積状態密度関数 (integrated density of states, IDS)$N(\lambda)$ は $\mathbb{R}$ 上の関数で、状態密度を $-\infty$ から λ まで積分したものであり、形式的には

$$N(\lambda) = \lim_{L \to \infty} \frac{\#\{\lambda \text{ 以下の } H_{\Gamma,L} \text{ の固有値 }\}}{(2L)^d}$$

で定義される。ここで、$H_{\Gamma,L}$ は H_Γ の $(-L, L)^d$ へのディリクレ条件での制限である。ポアソン点過程の平行移動に関するエルゴード性により、H_Γ の IDS とスペクトルは Γ の実現値によらず定まる。さらに、IDS は非負広義単調増加関数で、スペクトル上でのみ増加する。IDS の厳密な定義と、IDS やスペクトルの性質については [1] を参照せよ。

スペクトルの下限で IDS は 0 となるが、λ が上からスペクトルの下限に近づくときに $N(\lambda)$ が指数的に減衰するということが、ランダムシュレディンガー作用素の典型的な性質として知られてい

る。このことは Lifshitz[6] によって初めて指摘され、中尾 [7] は Donsker-Varadhan[3] の手法を用いて、一点当たりのポテンシャル u が非負である場合に、

$$\log N(\lambda) \sim -C\lambda^{-d/2} \quad (\lambda \downarrow 0)$$

となることを示した。ここで C は次元 d にのみよる定数である。様々なモデルで、IDS の減衰挙動の研究がなされている。ポアソン点過程 Γ と非正の一点当たりのポテンシャル u に対して、スペクトルの下限は $-\infty$ であり、Pastur[9] は

$$\log N(\lambda) \sim -\frac{|\lambda| \log |\lambda|}{\max |u|} \quad (\lambda \downarrow -\infty) \tag{2}$$

であることを証明した。

本講演では、[8] に基づいて、式 (1) において u が非正で Γ がギブス点過程である場合の IDS の減衰挙動を考える。ギブス点過程とは、ランダムな点の配置で点同士に相互作用があるものをいう。新たに一点を追加するときのエネルギー変化量が有界であるような相互作用の場合、対応する IDS の減衰挙動はポアソン点過程の場合の減衰挙動 (2) と一致することを示す。また、相互作用が二点間相互作用の場合、対応する IDS はポアソン点過程の場合の IDS よりも遥かに速く減衰する場合があることを示す。

2　ギブス点過程

この章では [2] を参考にしてギブス点過程を導入する。集積点を持たないような $\mathbb{R}^d$ の部分集合全体の集合を $\mathcal{C}$ とし、σ-加法族 $\mathcal{F}$ を $\{M_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)}$ によって生成されるものとする。ここで、$\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ に対して $\mathcal{C}$ 上の関数 M_Λ を $M_\Lambda(\eta) = \#(\eta \cap \Lambda)$ で定めるものとする。点過程とは、$(\mathcal{C}, \mathcal{F})$ に値をとる確率変数のことをいう。強度 z のポアソン点過程 Γ とは、

- 任意の有界集合 $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ に対して、$M_\Lambda(\Gamma)$ が平均値 $z|\Lambda|$ のポアソン分布に従う。
- 任意の互いに素な有限個の集合 $\Lambda_1, \ldots, \Lambda_n \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ に対して、$M_{\Lambda_1}(\Gamma), \ldots, M_{\Lambda_n}(\Gamma)$ が独立な確率変数になる。

という性質により一意に定まる点過程のことをいう。

ギブス点過程とは点同士に相互作用があるような点過程である。$\mathbb{R}^d$ の有限部分集合全体の集合を $\mathcal{C}_f$ と書くことにすると、点同士の相互作用は $\mathcal{C}_f$ 上の関数 U(エネルギー関数と呼ぶ) により表される。本講演では簡単のために、エネルギー関数は $+\infty$ を値に取らず実数値のみを取るとする。局所エネルギー関数 h を、

$$h(x, \eta) = U(\{x\} \cup \eta) - U(\eta) \quad (x \in \mathbb{R}^d,\ \eta \in \mathcal{C}_f)$$

で定義する。局所エネルギー関数は、点の集合に新たに一点を追加したときのエネルギー変化量を表している。本講演では、

- エネルギー関数 U は、平行移動に関して不変である。
- 局所エネルギー関数 h は下に有界である。

- エネルギー関数 U が有限レンジ $R > 0$ を持つ。つまり任意の $x \in \mathbb{R}^d,\ \eta \in \mathcal{C}_f$ に対して $h(x,\eta) = h(x, \eta \cap B(x,R))$ が成立する。

ということを仮定する。ここで、$B(x,R)$ は中心 x 半径 R の閉球を表す。これらの仮定は、ギブス点過程の研究では度々置かれる仮定である。

有界集合 $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ に対して、

$$U_\Lambda(\eta_\Lambda \cup \gamma_{\Lambda^c}) = U(\eta_\Lambda \cup \gamma_{\Lambda_R}) - U(\gamma_{\Lambda_R}) \quad (\eta, \gamma \in \mathcal{C})$$

と定める。ここで、η_Λ は集合 $\eta \cap \Lambda$ を表すとし、$\Lambda_R = \{x + y \mid x \in \Lambda,\ |y| \le R\} \setminus \Lambda$ とする。

定義 1. エネルギー関数 U に関するギブス点過程とは、C 上の分布 P_{Gib} が、任意の有界集合 $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ と C 上の有界可測関数 f に対して、

$$\int_{\mathcal{C}} f(\eta) P_{\mathrm{Gib}}(d\eta) = \int_{\mathcal{C}} \frac{1}{Z_\Lambda(\gamma)} \int_{\mathcal{C}} f(\eta_\Lambda \cup \gamma_{\Lambda^c}) e^{-U_\Lambda(\eta_\Lambda \cup \gamma_{\Lambda^c})} P_{\mathrm{Poi}}(d\eta) P_{\mathrm{Gib}}(d\gamma) \tag{3}$$

を満たすような点過程である。ここで、P_{Poi} は強度 1 のポアソン点過程の分布であり、$Z_\Lambda(\gamma) = \int_{\mathcal{C}} e^{-U_\Lambda(\eta_\Lambda \cup \gamma_{\Lambda^c})} P_{\mathrm{Poi}}(d\eta)$ である。

エネルギー関数 U が恒等的に 0 であるとき、対応するギブス点過程は強度 1 のポアソン点過程となる。式 (3) は Dobrushin-Lanford-Ruelle 方程式 (DLR 方程式) と呼ばれる。本講演の設定では、エネルギー関数 U に対応する DLR 方程式の解は必ず存在するが、一意性が成り立つとは限らない [2]。一般に、R が十分に小さいときに一意性が成立することが知られている [5]。また、解が一意に存在するとき、対応するギブス点過程は平行移動に関して定常かつエルゴード性を持つことが知られている [11]。

エネルギー関数の例を挙げてこの章を終える。

例 1 (二点間相互作用)**.** $\mathcal{C}_f$ 上の関数 U で、

$$U(\eta) = \frac{1}{2} \sum_{x \neq y \in \eta} \phi(|x - y|) \tag{4}$$

と表されるものは、エネルギー関数となる。ここで、ϕ は $[0, \infty)$ 上の非負値関数で、$x > R$ ならば $\phi(x) = 0$ が成立しているものとする。このとき、局所エネルギー関数 h は非負であるが、ϕ が恒等的に 0 である場合を除いて、上に有界ではない。

例 2 (area interaction)**.** $\mathcal{C}_f$ 上の関数 U で、

$$U(\eta) = \Big| \bigcup_{x \in \eta} B(x,R) \Big|$$

と表されるものは、エネルギー関数となる。このとき、局所エネルギー関数 h は $0 \le h \le |B(0,R)|$ を満たす。

3　主定理

式 (1) において、Γ を平行移動に関して定常かつエルゴード性を持つギブス点過程としても IDS は定義され、Γ の実現値によらず定まる [1]。本講演の主定理は次の 2 つである。

定理 1 ([8])**.** 一点当たりのポテンシャル u が非正連続関数でコンパクトな台を持つとする。さらに、点過程 Γ がギブス点過程で、平行移動に関して定常かつエルゴード性を持ち、その局所エネルギー関数が有界であるとする。このとき、対応する IDS は式 (2) を満たす。

定理 2 ([8])**.** 一点当たりのポテンシャル u が非正連続関数でコンパクトな台を持つとする。さらに、点過程 Γ が、式 (4) で定義されたエネルギー関数に対応するギブス点過程であり、平行移動に関して定常かつエルゴード性を持つとする。ただし、$\phi(x) = a \cdot 1_{[0,R]}(x)$ $(0 < a < \infty)$ とする。ここで、1_A は集合 A の定義関数を表す。このとき、対応する IDS は、

$$\log N(\lambda) \sim -\frac{a}{2\|u\|_R^2}\lambda^2 \quad (\lambda \downarrow -\infty)$$

を満たす。ここで、

$$\|u\|_R^2 = \sup\{\sum_{i=1}^{\infty} u(x_i)^2 \mid |x_i - x_j| > R \ (i \neq j)\}$$

とする。

定理 2 の場合の IDS は、ポアソン点過程の場合の IDS よりも遥かに速く減衰することが分かる (cf. (2))。

4　証明の方針

4.1　減衰挙動の上からの評価

ポアソン点過程の場合の IDS の減衰挙動 (2) の証明 [10] と同様の考え方から、ギブス点過程のラプラス汎関数

$$\int_{\mathcal{C}} \exp(-t\sum_{x\in\eta} u(x)) P_{\mathrm{Gib}}(\eta)$$

の $t \to \infty$ のときの漸近挙動を調べることが IDS の減衰挙動の上からの評価を得るための鍵となる。

局所エネルギー関数が下に有界のとき、ギブス点過程のラプラス汎関数は、ある強度のポアソン点過程のラプラス汎関数で上から評価されることが知られている [4]。したがって、定理 1 における上からの評価は、ポアソン点過程の場合の評価に帰着させることができる。

しかし、定理 2 のような二点間相互作用のギブス点過程のラプラス汎関数は、ポアソン点過程のラプラス汎関数によって十分な評価をすることができない。そこで、u を単関数で近似し、その単関数に関するギブス点過程のラプラス汎関数を上から評価することを考える。その評価のために重要なのが次の補題である。

補題 1 ([8]). 定数 $c > 0,\ v_1, \ldots, v_k > 0$ と、集合 $\{(i,j) \in \mathbb{N}^2 \mid 1 \le i < j \le k\}$ の部分集合 I に対して、

$$\limsup_{t\to\infty} t^{-2} \log \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_k=0}^{\infty} \exp(-c\sum_{i=1}^{k} n_i^2 - 2c \sum_{(i,j)\in I} n_i n_j + t\sum_{i=1}^{k} v_i n_i)$$
$$\le \frac{1}{4c} \max_{J\in K_I} \sum_{i\in J} v_i^2$$

が成立する。ここで、$K_I = \{J \subset \{1,\ldots,k\} \mid i,j \in J$ ならば $(i,j) \notin I\}$ である。

4.2 減衰挙動の下からの評価

ポアソン点過程の場合の下からの評価 [10] と同様に、$V_\Gamma(0) < \lambda$ となる確率の評価から、IDS の減衰挙動の下からの評価が得られる。Γ がポアソン点過程の場合、その確率は、沢山の点が 1 つの小領域に密集する事象に影響を受ける。Γ が局所エネルギー関数が有界なギブス点過程の場合、その確率は、ポアソン点過程の場合と同じ事象に影響を受ける。したがって、定理 1 における下からの評価もポアソン点過程の場合に帰着させることができる。

一方、Γ が定理 2 のような二点間相互作用のギブス点過程の場合、反発力により小領域に沢山の点が密集するという事象は起こりにくくなり、むしろ、互いに距離が R より離れたいくつかの小領域に沢山の点が分散している事象の影響が大きくなる。このことに注意して確率の評価を行うことで定理 2 における下からの評価が得られる。

参考文献

[1] Carmona, R., Lacroix, J.: Spectral Theory of Random Schrödinger Operators. Probability and its Applications, Birkhäuser, Boston, Inc., Boston, MA (1990)

[2] Dereudre, D.: Introduction to the theory of Gibbs point processes, in Stochastic Geometry 181–229, Lecture Notes in Math., 2237. Springer, Cham (2019)

[3] Donsker, M.D., Varadhan, S.R.S.: Asymptotics for the Wiener sausage. Comm. Pure Appl. Math. **28**, 525–565 (1975)

[4] Georgii, H.-O., Küneth, T.: Stochastic comparison of point random fields. J. Appl. Probab. **34**, 868–881 (1997)

[5] Hofer-Temmel, C., Houdebert, P.: Disagreement percolation for Gibbs ball models. Stochastic Process. Appl. **129**, 3922–3940 (2019)

[6] Lifshitz, I.M. Energy spectrum structure and quantum states of disordered condensed systems. Uspehi Fiz. Nauk **83**, 617–663 (in Russian); translated as Soviet Physics Uspekhi **7** 549–573 (1965)

[7] Nakao, S.: On the spectral distribution of the Schrödinger operator with random potential. Japan. J. Math. (N.S.) **3**, 111–139 (1977)

[8] Nakagawa, Y.: Asymptotic behaviors of the integrated density of states for random Schrödinger operators associated with Gibbs Point Processes. Preprint, arXiv:2210.11381 (2022)

[9] Pastur, L.A.: The behavior of certain Wiener integrals as $t \to \infty$ and the density of states of Schrödinger equations with random potential. Teoret. Mat. Fiz. **32**, 88–95 (1977) (in Russian)

[10] Pastur, L., Figotin, A.: Spectra of Random and Almost-Periodic Operators. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, 297, Springer-Verlag, Berlin (1992)

[11] Preston, C.: Random Fields, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 534. Springer-Verlag, Berlin-New York (1976)