Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 36 (1963)
Heft: V

Artikel: Eine störungstheoretische Methode zur Lösung der Dyson-Schmidt-Gleichung
Autor: Schlup, Werner A.
DOI: https://doi.org/10.5169/seals-113389

Nutzungsbedingungen
Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use
The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 14.07.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Eine störungstheoretische Methode zur Lösung der Dyson-Schmidt-Gleichung

von **Werner A. Schlup**

Institut für theoretische Physik der Universität Zürich

(22. XII. 62)

Zusammenfassung: Die Dyson-Schmidt-Gleichung für die Auslenkungsquotienten- und Frequenzverteilung der Gitterschwingungen in einer isotopisch ungeordneten linearen Kette wird für den binären Kristall durch eine Störungsentwicklung gelöst. Die Lösung stimmt mit der Clusterentwicklung überein.

§ 1. Einleitung

In einem isotopisch ungeordneten Kristall sind die geometrischen Gitterplätze von gewissen Atomsorten mit gewissen Wahrscheinlichkeiten besetzt, wobei im allgemeinen die Massen als stochastische Grössen mit einer gegebenen Verteilung und die Gitterkräfte als fest angenommen werden. Um die Verteilung der Eigenfrequenzen der Gitterschwingungen in einem solcher Art ungeordneten Kristall zu ermitteln, kann man verschieden vorgehen.

A) MONTROLL, POTTS[1]) und LIFSCHITZ, STEPANOVA[2]) benützen zur Berechnung von Mittelwerten additiver Funktionen (zum Beispiel freie Energie, Entropie, spezifische Wärme) einen funktionentheoretischen Satz, der im Prinzip direkt die Bestimmung der Verteilung erlaubt. Allerdings muss man sich schon für sehr einfache Ensembles wie zum Beispiel den binären Kristall mit störungstheoretischen Entwicklungen nach der Konzentration der seltenen Komponente begnügen. Die einzelnen Terme dieser Entwicklung lassen sich in Analogie zur Virialentwicklung als Beiträge gewisser Störatomcluster interpretieren, weshalb man auch von einer Clusterentwicklung spricht.

B) Anderseits kann man aus den Frequenzmomenten Aufschluss über die Verteilung bekommen. DOMB, MARADUDIN, MONTROLL, WEISS[3]) haben diese Momentenmethode (MONTROLL[4])) benützt, um aus den ersten zehn Momenten von ω^2 durch einen geeigneten Polynomialansatz die Verteilung numerisch zu ermitteln. In ähnlicher Weise wurde diese Methode von HORI[5]) verwendet. Im Sinne einer Potenzreihenapproximation wurde von PIRENNE[6]) die Verteilung für kleine Massenabwei-

chung, von SCHLUP[7]) für kleine Störkonzentrationen aus den Momenten berechnet. Die Ergebnisse stimmen mit der Clusterentwicklung überein. Die numerische Anpassung von endlich vielen Momenten gibt im allgemeinen nur Aufschluss über den globalen Verlauf des Frequenzspektrums.

C) Um eine quantitative Einsicht in den lokalen Verlauf zu erhalten, wurde von DEAN, MARTIN[8]) die Verteilung durch Auszählen der Eigenwerte einer guten Ensemblestichprobe ermittelt. Insbesondere für den Störbereich ergibt sich eine sehr differenzierte Bänderstruktur, die sich bereits in der Störlinienstruktur der Clusterentwicklung andeutet.

D) Die bisherigen Methoden konzentrierten sich ausschliesslich auf das Frequenzspektrum. Für gewisse physikalische Eigenschaften benötigt man aber auch Information über die Verteilung der Gitteratomauslenkungen. WALLIS, MARADUDIN[9]) bestimmten die durch das Gesamtdipolmoment gegebene Infrarotabsorption der Gitterschwingungen bei Anwesenheit von Störatomen, indem sie den Einfluss von ein bzw. zwei Störzentren in einem reinen linearen Kristall direkt (das heisst ohne Wahrscheinlichkeitsvoraussetzungen) diskutierten. Die Ergebnisse waren dabei von der Wahl der Randbedingungen abhängig.

Eine von den Auslenkungen abhängige Grösse, die in linearen Ketten mit Wechselwirkung nächster Nachbarn eine Rolle spielt, ist der Auslenkungsquotient. SCHMIDT[10]) hat für dessen Verteilungsfunktion eine inhomogene Integralgleichung mit asymmetrischem, singulärem Kern aufgestellt, die für binäre Kristalle in eine inhomogene Funktionalgleichung, die Dyson-Schmidt-Gleichung übergeht. Ihre Lösung bietet sowohl die Verteilung des Auslenkungsquotienten tief im Innern der Kette als auch die Frequenzverteilung. Trotzdem man sich nur für die Frequenzverteilung interessiert, ist es dennoch nötig, zur Lösung der Funktionalgleichung die Auslenkungsquotientenverteilung mitzubestimmen, ähnlich wie die Ermittlung der Energieeigenwerte bei der Schrödinger-Gleichung zwangsläufig die Berechnung der Eigenfunktion erfordert.

Das erste Mal wurde eine derartige Gleichung von DYSON[11]) in der Theorie der ungeordneten Gitter eingeführt, die in einem Spezialfall exakt gelöst werden konnte. Von BELLMAN[12]) wurde der Beweis vereinfacht und von DES CLOIZEAUX[13]) die Gleichung durch Einführung der Phasen umgeformt. Leider kann eine derartige Gleichung nur für eindimensionale Probleme aufgestellt werden, wobei zudem die Wechselwirkungskräfte nur bis zum nächsten Nachbarn reichen dürfen. Trotz dieses Nachteils gibt auch der eindimensionale Kristall eine qualitative Einsicht in den physikalischen Sachverhalt, zum Beispiel im Hinblick auf die Störlinienverbreiterung zu einem Störband. Ferner ist die Methodik zur Lösung derartiger Funktionalgleichungen, die in Verbindung mit der Wahrscheinlichkeitsrechnung immer häufiger auftreten, von einem gewissen Interesse (siehe ACZÉL[14])).

Für die folgende Arbeit wollen wir die Schmidt-Form dieser Gleichung, die einem isotopisch ungeordneten Kristall entspricht, zu Grunde legen. In § 2 wird die Herleitung der Schmidt-Gleichung skizziert und der Fall des periodischen Gitters diskutiert. In § 3 wird eine zweigliedrige lineare Funktionalgleichung durch eine geeignete Substitution in eine Differenzengleichung verwandelt. Dieses Verfahren wird zur Vereinfachung der Schmidt-Gleichung benützt, die in § 4 durch einen Potenzreihenansatz nach der Störkonzentration gelöst wird. § 5: Diskussion der Resultate.

§ 2. Die Dyson-Schmidt-Gleichung und ihre Anwendung auf das periodische Gitter

Wir betrachten eine lineare Kette von Atomen, deren Masse m_n im n-ten Gitterpunkt mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $g(m_n)$ verteilt ist, und die nachbarweise miteinander harmonisch gekoppelt sind. Die Enden seien fest, so dass die Randbedingungen $u_0 = u_{N+1} = 0$ lauten, wobei u_n die Auslenkung des n-ten Atoms von geometrischem Gitterplatz ist. Damit wird die Bewegungsgleichung

$$m_n \ddot{u}_n = K\,(u_{n+1} + u_{n-1} - 2\,u_n) \tag{2.1}$$

oder mit

$$\left.\begin{aligned} u_n &\sim e^{i\omega t}, \quad z_n = \frac{u_{n-1}}{u_n} \\ \alpha_n &= 1 - \frac{m_n\,x}{2}, \quad x = \frac{\omega^2}{K} \end{aligned}\right\} \tag{2.2}$$

nimmt sie die Gestalt

$$z_{n+1} = \frac{1}{2\,\alpha_n - z_n} \tag{2.3}$$

an, wobei $z_1 = 0$, $z_{N+1} = \infty$ die neuen Randbedingungen sind.

Aus der Randbedingung $z_{N+1} = \infty$ folgt, dass die Anzahl der Frequenzeigenwerte $x^\nu < x$ gleich der Anzahl negativer z_n der nach links verankerten Folge $z_1 = 0$, $z_2(x), \ldots, z_N(x)$ ist (siehe [10]); das heisst man kann in einer statistischen Theorie die Verteilungsfunktion der Frequenzen aus den Verteilungen des Auslenkungsquotienten ermitteln, ohne von der Randbedingung $z_{N+1} = \infty$ Gebrauch zu machen.

Es sei $w_n(z)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, den Auslenkungsquotienten z_n in einem Intervall $(z, z + dz)$ zu finden; ferner sei $W_n(z)$ die zugehörige Verteilungsfunktion, so dass $dW_n(z)/dz = w_n(z)$ ist. In einer nach links verankerten Folge sind z_n und m_n statistisch unabhängig, daher lässt sich die Verteilung für z_{n+1} folgendermassen aus der Verteilung für z_n berechnen:

$$w_{n+1}(z_{n+1})\,dz_{n+1} = \int dm_n\, g(m_n)\, w_n\big(z_n(z_{n+1}, m_n)\big)\,dz_n \tag{2.4}$$

oder

$$w_{n+1}(z) = \int dm\, g(m)\, w_n\Big(2 - m\,x - \frac{1}{z}\Big)\,\frac{1}{z^2} \tag{2.5}$$

mit $w_1(z) = \delta(z)$.

Falls für $n \to \infty$ die Verteilungen einem Grenzwert $w(z)$ zustreben, gilt die Integralgleichung

$$w(z) = \int dm\, g(m)\, w\Big(2 - m\,x - \frac{1}{z}\Big)\,\frac{1}{z^2} \tag{2.6}$$

oder

$$w(z) = \int dz'\,\frac{1}{x\,z^2}\,g\Big(\frac{2 - 1/z - z'}{x}\Big)\,w(z') \tag{2.7}$$

Wegen der Asymmetrie des Kerns der homogenen Integralgleichung (2.7) kann man kein einfaches Variationsprinzip für $w(z)$ aufstellen.

Durch Integration von (2.6) erhält man die Dyson-Schmidt-Gleichung für die Verteilungsfunktion $W(z)$

$$W(z) = \int dm\, g(m)\, W\Big(2 - m\, x - \frac{1}{z}\Big) + C\,, \tag{2.8}$$

wobei

$$C = \int_{-\infty}^{0} w(z)\, dz \tag{2.9}$$

wegen der obigen Charakterisierung die Anzahl Frequenzeigenwerte $x^\nu < x$ pro Atom, das heisst die Verteilungsfunktion für die Frequenzen darstellt. SCHMIDT bewies ferner, dass die $W_n(z)$ im arithmetischen Mittel gegen eine stetige Funktion $W(z)$ konvergieren, deren Ableitung $w(z)$ ergibt. Damit die einfache Gestalt der Dyson-Schmidt-Gleichung gilt, muss man zulassen, dass $W(z)$ eine mehrdeutige Funktion ist, die allerdings modulo 1 eindeutig wird.

Für diskrete Massenverteilungen (r Atomarten mit der Masse m^j in der Konzentration p^j) geht die Integralgleichung (2.8) in eine Funktionalgleichung über:

$$W(z) = \sum_{j=1}^{r} p^j\, W\Big(2 - m^j\, x - \frac{1}{z}\Big) + C\,. \tag{2.10}$$

In analoger Weise könnte man die z_n-Folge nach rechts ($z_{N+1} = \infty$, $\overline{w}_{N+1}(z) = \delta(z - \infty)$) verankern, dann wären z_{n+1} und m_n statistisch unabhängig, und die (2.6), (2.7) und (2.8) entsprechenden Gleichungen würden lauten, falls man den Limes abnehmender Indizes betrachtet:

$$\overline{w}(z) = \int dm\, g(m)\, \overline{w}\Big(\frac{1}{2 - m\, x - z}\Big)\, \frac{1}{(2 - m\, x - z)^2}\,, \tag{2.11}$$

$$\overline{w}(z) = \int dz'\, \frac{1}{x}\, g\Big(\frac{2 - z - 1/z'}{x}\Big)\, \overline{w}(z')\,, \tag{2.12}$$

$$\overline{W}(z) = \int dm\, g(m)\, \overline{W}\Big(\frac{1}{2 - m\, x - z}\Big) - C\,. \tag{2.13}$$

Die Gleichungsgruppen gehen ineinander über, wenn man setzt

$$\overline{w}(z) = \frac{1}{z^2}\, w(z) \quad \text{bzw.} \quad \overline{W}(z) = -\, W\Big(\frac{1}{z}\Big)\,, \tag{2.14}$$

was auch aus der Transformation $\bar{z}_n = 1/z_n$ folgt, die die linksverankerte Kette in die rechtsverankerte verwandelt. Im Folgenden wollen wir nur die linksverankerte Form verwenden.

Bevor wir zur Lösung der Dyson-Schmidt-Gleichung schreiten, sei der Fall des periodischen Gitters diskutiert. Für festen linken Rand ($u_0 = 0$) wird

$$u_n = A \sin n\,\tau\,, \quad x = \frac{4}{m} \sin^2 \frac{\tau}{2}\,, \tag{2.15}$$

also

$$z_n = \frac{\sin(n-1)\,\tau}{\sin n\,\tau} = \cos\tau - \sin\tau\, \operatorname{ctg} n\,\tau \tag{2.16}$$

und

$$w_n(z) = \delta(z - z_n)\,. \tag{2.17}$$

Die Verteilung $w_n(z)$ strebt im Limes $n \to \infty$ keinem Grenzwert zu, da die z_n keinen Grenzwert haben. Hingegen strebt die Wahrscheinlichkeitsdichte im arithmetischen Mittel gegen eine Grenzverteilung $w(z)$, die durch die Verteilung aller z_n der Folge auf der z-Axe gegeben ist.

Für irrationale τ/π wird wegen der Gleichwahrscheinlichkeit der einzelnen n

$$w(z) = \text{Const} \cdot \frac{dn}{dz} , \tag{2.18}$$

wobei die Konstante aus der Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(z)\, dz = 1$$

folgt.

Man findet leicht aus (2.16)

$$w(z) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin\tau}{z^2 - 2\cos\tau\, z + 1} \tag{2.19}$$

und analog

$$W(z) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{z - \cos\tau}{\sin\tau} . \tag{2.20}$$

Die zugehörige Frequenzverteilungsfunktion wird

$$C = W(0) - W(-\infty) = \frac{\tau}{\pi} \tag{2.21}$$

in Übereinstimmung mit der konstanten Eigenwertdichte in τ. Dass (2.19) und (2.20) tatsächlich eine Lösung der Dyson-Schmidt-Gleichung ist, kann man leicht verifizieren.

Für rationale $\tau/\pi = P/Q$, wobei P und Q natürliche, relativ prime Zahlen sind, durchläuft z_n zyklisch die Werte $z_1 = 0, z_2, \ldots, z_Q = \infty$. Daher wird die Wahrscheinlichkeitsdichte im arithmetischen Mittel gegen die diskrete Verteilung

$$w(z) = \frac{1}{Q} \sum_{n=1}^{Q} \delta(z - z_n) \tag{2.22}$$

streben. Wir wollen diese diskontinuierlichen Lösungen, die typisch für gitterkommensurable Wellen in periodischen Ketten sind, als nullte Näherung zur Behandlung von Störeffekten in unendlichen Gittern ausschliessen, weil sie nicht modulo 1 eindeutige Lösungen der Dyson-Schmidt-Gleichung sind.

§ 3. Differenzenform der Dyson-Schmidt-Gleichung

Um eine der störungstheoretischen Behandlung adäquate Form zu erhalten, führt man eine passende mittlere Masse m_0 ein und ersetzt $z \to 1/(2 - m_0\, x - z)$ in (2.8):

$$W\left(\frac{1}{2 - m_0\, x - z}\right) = \int dm\, g(m)\, W\big(z - (m - m_0)\, x\big) + C . \tag{3.1}$$

Falls eine Taylorentwicklung des Integranden erlaubt ist und alle Momente der Massenverteilung existieren, wird

$$W\left(\frac{1}{2 - m_0\, x - z}\right) - W(z) - C = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \overline{(\Delta_0\, m)^n}\, x^n \left(\frac{d}{dz}\right)^n W(z) , \tag{3.2}$$

wobei

$$\overline{(\Delta_0 m)^n} = \overline{(m - m_0)^n} = \int dm\, g(m)\, (m - m_0)^n \,. \tag{3.3}$$

Für Kristalle, deren Massenverteilung nur wenig von der scharfen Verteilung abweicht, sind die Momente $\overline{(\Delta_0 m)^n}$ bei geeigneter Wahl von m_0 klein, so dass die rechte Seite störungsmässig berücksichtigt werden kann.

Zunächst wollen wir die obige Funktionalgleichung in eine Differenzengleichung verwandeln. Gelingt es, die im allgemeinen nichtlineare Rekursion $z_{n+1} = \phi(z_n)$ zu lösen und die Lösung $z(n, z_1)$ für beliebige n analytisch fortzusetzen, so wird mit der Definition

$$W(z) = W\big(z(n, z_1)\big) \equiv V(n) \,,$$

$$W\big(\phi(z)\big) = W\big(z(n+1, z_1)\big) = V(n+1)$$

der zweigliedrige Funktionalausdruck $W(\phi(z)) - W(z)$ in den Differenzenausdruck $V(n+1) - V(n)$ umgeformt. Da wir die Lösung im periodischen Gitter (2.16) bereits kennen, können wir die Substitution daraus ablesen:

$$\frac{z - \cos\tau}{\sin\tau} = \operatorname{tg}\varrho \,, \quad z = \frac{\cos(\varrho - \tau)}{\cos\varrho} \,, \tag{3.4}$$

wobei

$$\cos\tau = \alpha_0 = 1 - \frac{m_0 x}{2} \,.$$

Mit der Definition

$$W(z) = W\Big(\frac{\cos(\varrho - \tau)}{\cos\varrho}\Big) \equiv V(\varrho) \tag{3.5}$$

wird

$$W\Big(\frac{1}{2 - m_0 x - z}\Big) = V(\varrho + \tau)$$

und damit die Dyson-Schmidt-Gleichung

$$V(\varrho + \tau) - V(\varrho) - C = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!}\, \overline{(\Delta_0 m)^n} \Big(\frac{2\operatorname{tg}\tau/2}{m_0}\Big)^n \Big(\frac{d}{d\operatorname{tg}\varrho}\Big)^n V(\varrho) \,, \tag{3.6}$$

wobei das mehrdeutige $W(z)$ durch die uniformisierende Variable ϱ (ein Bereich $-\infty < z < \infty$ wird auf die Strecke $-\pi/2 < \varrho < \pi/2$ abgebildet) in das eindeutige $V(\varrho)$ mit der Nebenbedingung

$$V(\varrho + \pi) - V(\varrho) = 1 \tag{3.7}$$

transformiert wird. Von dieser Form ausgehend wollen wir nun die Störungstheorie durchführen.

§ 4. Entwicklung der Verteilungsfunktion von binären Kristallen nach kleinen Störkonzentrationen c

Wir wählen $m_0 = m_1$ (Hauptkomponente) und machen den Ansatz

$$\left.\begin{aligned} V(\varrho) &= V_0(\varrho) + q\, V_1(\varrho) + q^2\, V_2(\varrho) + \cdots, \\ C \quad &= C_0 \quad\;\; + q\, C_1 \quad\;\; + q^2\, C_2 \quad\;\; + \cdots. \end{aligned}\right\} \tag{4.1}$$

Wegen

$$\overline{(\Delta_0 m)^n} = q(m_2 - m_1)^n \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

wird somit (3.6)

$$V(\varrho + \tau) - V(\varrho) - C = q \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (2\beta)^n D_n V(\varrho) , \tag{4.2}$$

wobei

$$\varepsilon = 1 - \frac{m_2}{m_1} , \quad \beta = \varepsilon \operatorname{tg} \tau/2$$

und

$$D_n = \left(\frac{d}{d \operatorname{tg} \varrho}\right)^n$$

ein Differentialoperator ist.

In der Störungstheorie erhalten wir das schrittweise lösbare System von Differenzengleichungen mit Nebenbedingungen

$$\left.\begin{aligned} V_0(\varrho + \tau) - V_0(\varrho) - C_0 &= 0 , \\ V_1(\varrho + \tau) - V_1(\varrho) - C_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2\beta)^n}{n!} D_n V_0(\varrho) , \\ V_2(\varrho + \tau) - V_2(\varrho) - C_2 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2\beta)^n}{n!} D_n V_1(\varrho) . \end{aligned}\right\} \tag{4.3}$$

usw.

$$\left.\begin{aligned} V_0(\varrho + \pi) - V_0(\varrho) &= 1 , \\ V_1(\varrho + \pi) - V_1(\varrho) &= 0 , \\ V_2(\varrho + \pi) - V_2(\varrho) &= 0 . \end{aligned}\right\} \tag{4.4}$$

usw.

Die formale Lösung von (4.3a) und (4.4a) lautet

$$V_0(\varrho) = \frac{\varrho}{\pi} + P_{\tau,\pi}(\varrho) , \quad C_0 = \frac{\tau}{\pi} , \tag{4.5}$$

wobei $P_{\tau,\pi}(\varrho)$ eine periodische Funktion mit den Perioden τ und π darstellt. Wenn τ und π inkommensurabel sind, ist $P_{\tau,\pi}(\varrho) = \text{Const}$, die gleich Null gesetzt werden darf, so lange die Normierung von $V(\varrho)$ offen bleibt. Im Gegensatz dazu wird die Lösung für die Nullmenge kommensurabler τ und π, das heisst $\tau = \pi P/Q$ und P, Q relativ prim, mehrdeutig, da $P_{\tau,\pi}(\varrho)$ eine beliebige periodische Funktion mit der Periode π/Q sein kann, die zusammen mit ϱ/π nicht abnimmt. Für $Q \to \infty$ oder τ/π irrational verschwindet diese Mehrdeutigkeit. Nach einer Bemerkung von § 2 haben wir die sägezahnförmige periodische Funktion $P_{\tau,\pi}(\varrho)$ auch für rationale τ/π durch die Konstante zu ersetzen. Ähnliche Beiträge in höheren Ordnungen (Lösung der homogenen Gleichung) müssen konsequenterweise ebenfalls ausgenommen werden.

Damit wird die Lösung in nullter Ordnung

$$V_0(\varrho) = \frac{\varrho}{\pi} , \quad C_0 = \frac{\tau}{\pi} . \tag{4.6}$$

Die allgemeine Lösung der Differenzengleichung

$$V(\varrho + \tau) - V(\varrho) = R(\varrho) = \sum_n R_n \, e^{2in\varrho} \tag{4.7}$$

lautet, falls τ/π irrational ist:

$$V(\varrho) = P_\tau(\varrho) + \frac{\varrho}{\tau} R_0 + \sum_{n \neq 0} \frac{R_n \, e^{2in\varrho}}{e^{2in\tau} - 1} \,. \tag{4.8}$$

Sie kann nur dann der Nebenbedingung $V(\varrho + \pi) = V(\varrho)$ genügen, wenn

$$R_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} R(\varrho) \, d\varrho = 0 \tag{4.9}$$

ist und wird folglich

$$V(\varrho) = \text{Const} + \sum_{n \neq 0} \frac{R_n \, e^{2in\varrho}}{e^{2in\tau} - 1} \,. \tag{4.10}$$

Falls der Imaginärteil von τ nicht verschwindet, kann der Nenner in eine geometrische Reihe entwickelt und die Summe über n ausgeführt werden; man erhält dadurch die bekannte iterative Lösung der Differenzengleichung (4.7).

Die Gleichung (4.3b) und die Nebenbedingung (4.4b) lässt sich nach Einsetzen von (4.6) folgendermassen schreiben:

$$V_1^+(\varrho + \tau) - V_1^+(\varrho) - C_1^+ = \frac{1}{\pi} \ln(1 + i\,\beta + i\,\beta \, e^{-2i\varrho}) \tag{4.11}$$

$$V_1^+(\varrho + \pi) - V_1^+(\varrho) = 0 \,, \tag{4.12}$$

wobei

$$V_1(\varrho) = J \, V_1^+(\varrho) \,, \quad C_1 = J \, C_1^+ \,. \tag{4.13}$$

$V_1^+(\varrho)$ und C_1^+ kann man für beliebige komplexe x bzw. τ analytisch fortsetzen, falls man die Bedingung (4.9) durch Deformation des reellen Integrationsweges nach negativ imaginären ϱ-Werten verallgemeinert.

Somit wird

$$C_1^+ = -\frac{1}{\pi} \ln(1 + i\,\beta) \tag{4.14}$$

eine abgesehen vom Logarithmus in der x-Ebene zweideutige analytische Funktion mit den Verzweigungspunkten $x = 0$ und $x = x_1 = 4/m_1$. Sie kann zweideutig für $x > x_1$ (bzw. $x < 0$) fortgesetzt werden. Ihr Wert am oberen Ufer ist $1 - \varepsilon \sqrt{x/(x - x_1)}$ bzw. am unteren Ufer $1 + \varepsilon \sqrt{x/(x - x_1)}$. Da nach dem Saxon-Hutner-Luttinger-Theorem für x ausserhalb des Intervalls $0 \leq x \leq 4/m_{Min}$ keine Eigenfrequenzen existieren, hat nur der Beitrag auf dem oberen Ufer einen physikalischen Sinn, oder die analytische Fortsetzung hat für $J\,x > 0$ bzw. $0 < \Re\,\tau < \pi$, $J\,\tau > 0$ zu geschehen. Man kann diese physikalische Lösung auf die ganze x-Ebene bzw. auf den Halbstreifen $0 < \Re\,\tau < 2\,\pi$, $J\,\tau > 0$ ausdehnen, wenn man den Schnitt von $x = 0$ nach $x = x_1$ führt. In diesem Sinne ist C_1^+ der Schnittwert am oberen Ufer der x-Ebene, während der Schnittwert am unteren Ufer dem konjugiert Komplexen entspricht, so dass C_1 im wesentlichen der Funktionssprung auf dem Schnitt ist.

Oder als Grenzwert geschrieben wird (für die höheren Ordnungen $C_2, C_3, \ldots$ ist ein kleiner Imaginärteil $\delta > 0$ zur Konvergenzerzeugung wichtig)

$$C_1 = \lim_{\delta \to +0} J\, C_1^+ \big|_{x + i\delta} . \tag{4.15}$$

Mit (4.14) wird die Gleichung (4.11) für V_1^+:

$$V_1^+(\varrho + \tau) - V_1^+(\varrho) = R_1^+(\varrho) = \frac{1}{\pi} \ln\left(1 + \frac{i\beta}{1 + i\beta}\, e^{-2i\varrho}\right) . \tag{4.16}$$

Da im physikalischen Blatt $J\,\tau > 0$ ist, kann man die partikuläre Lösung durch Iteration von (4.16) finden:

$$V_1^+(\varrho) = \sum_{l=1}^{\infty} R_1^+(\varrho - l\,\tau) . \tag{4.17}$$

Die Lösung der homogenen Gleichung entfällt nach einer früheren Bemerkung; daher lautet die Lösung in erster Ordnung:

$$V_1^+(\varrho) = \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{\infty} \ln\left(1 + \frac{i\beta}{1 + i\beta}\, e^{2il\tau}\, e^{-2i\varrho}\right) . \tag{4.18}$$

Im Appendix wird durch vollständige Induktion bewiesen, dass sich die Lösung in n-ter Ordnung folgendermassen darstellen lässt:

$$V_n^+(\varrho) = \sum_{l_1, l_2, \ldots l_n = 1}^{\infty} \frac{1}{\pi} \ln \begin{Vmatrix} 1 + i\beta & i\beta\, e^{il_1\tau} & i\beta\, e^{i(l_1 + l_2)\tau} & \ldots & i\beta\, e^{i(l_1 + \cdots + l_n)\tau} \\ i\beta\, e^{il_1\tau} & 1 + i\beta & i\beta\, e^{il_2\tau} & \ldots & i\beta\, e^{i(l_2 + \cdots + l_n)\tau} \\ i\beta\, e^{i(l_1 + l_2)\tau} & i\beta\, e^{il_2\tau} & 1 + i\beta & \ldots & i\beta\, e^{i(l_3 + \cdots + l_n)\tau} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ i\beta\, e^{i(l_1 + l_2 + \cdots + l_{n-1})\tau} & \ldots & \ldots & 1 + i\beta & i\beta\, e^{il_n\tau} \\ -e^{-2i\varrho}\, e^{i(l_1 + \cdots + l_n)\tau} & \ldots & \ldots & -e^{-2i\varrho}\, e^{il_n\tau} & 1 \end{Vmatrix} . \tag{4.19}$$

$$C_n^+ = -\sum_{l_1, l_2, \ldots l_{n-1} = 1}^{\infty} \frac{1}{\pi} \ln \begin{Vmatrix} 1 + i\beta & i\beta\, e^{il_1\tau} & i\beta\, e^{i(l_1 + l_2)\tau} & \ldots & i\beta\, e^{i(l_1 + \cdots + l_{n-1})\tau} \\ i\beta\, e^{il_1\tau} & 1 + i\beta & i\beta\, e^{il_2\tau} & \ldots & i\beta\, e^{i(l_2 + \cdots + l_{n-1})\tau} \\ i\beta\, e^{i(l_1 + l_2)\tau} & i\beta\, e^{il_2\tau} & 1 + i\beta & \ldots & i\beta\, e^{i(l_3 + \cdots + l_{n-1})\tau} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 + i\beta & i\beta\, e^{il_{n-1}\tau} \\ i\beta\, e^{i(l_1 + \cdots + l_{n-1})\tau} & \ldots & \ldots & i\beta\, e^{il_{n-1}\tau} & 1 + i\beta \end{Vmatrix} . \tag{4.20}$$

$$V_n(\varrho) = \lim_{\delta \to +0} J\, V_n^+(\varrho)\,|_{x + i\delta}\,. \tag{4.21}$$

$$C_n = \lim_{\delta \to +0} J\, C_n^+\,|_{x + i\delta}\,, \tag{4.22}$$

für $n = 1, 2, 3, \ldots$,
wobei $\| a_{ik} \|$ der Hauptminorenquotient einer quadratischen Matrix ist:

$$\left\| \begin{matrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ a_{n1} & \ldots & a_{nn} \end{matrix} \right\| = \frac{\text{Produkt aller Hauptminoren der Ordnung } n,\ n-2,\ n-4, \ldots,}{\text{Produkt aller Hauptminoren der Ordnung } n-1,\ n-3,\ n-5, \ldots,} \tag{4.23}$$

zum Beispiel

$$\left\| \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{matrix} \right\| = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \cdot a_{11} \cdot a_{22} \cdot a_{33}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}}\,. \tag{4.24}$$

Damit haben wir die Dyson-Schmidt-Gleichung störungstheoretisch exakt gelöst, das heisst die Lösung in jeder Ordnung explizite angegeben. Exakt im eigentlichen Sinne wäre die Lösung erst dann, wenn man die Konvergenz der Reihen (4.1) nachweisen könnte. Die Lösung in Form der Hauptminorenquotienten ist typisch für eine Clusterentwicklung, die sich physikalisch in einfacher Weise interpretieren lässt. Sie ergibt ein Eigenfrequenzspektrum, das für leichtere Störatome $m_2 < m_1$ eine komplizierte Störlinienstruktur aufweist.

Um die Verbindung zur funktionentheoretischen Methode (siehe [1],[2])) herzustellen, werde der Erwartungswert $\overline{\phi}$ einer frequenzabhängigen Funktion $\phi(x)$, die für reelle, positive x analytisch ist, berechnet:

$$\overline{\phi} = \int_0^\infty \phi(x)\, dC(x)\,. \tag{4.25}$$

Führt man die in der geschlitzten x-Ebene analytische Funktion

$$C^+ = C_0^+ + q\, C_1^+ + q^2\, C_2^+ + \cdots \tag{4.26}$$

mit

$$C_0^+ = -\frac{1}{\pi} \ln\left(2\,\frac{x}{x_1} - 1 + 2\,i\,\frac{\sqrt{x(x_1 - x)}}{x_1}\right)$$

ein, so lässt sich (4.25) als komplexes Integral

$$\overline{\phi} = -\frac{1}{2\,i} \oint \phi(x)\, dC^+(x) \tag{4.27}$$

schreiben, weil

$$C^+(x - i\,\delta) = C^{+*}(x + i\,\delta) \tag{4.28}$$

ist und sich daher die imaginären Beiträge wegheben. Der Weg ist so zu wählen, dass er die Strecke $0 \leq x \leq 4/m_{Min}$, auf der alle Eigenfrequenzen liegen, im positiven Sinne umfährt.

§ 5. Diskussion

In den vorhergehenden Kapiteln wurde gezeigt, dass die Dyson-Schmidt-Gleichung für kleine Abweichungen von der scharfen Massenverteilung periodischer Gitter approximativ gelöst werden kann. Die Frequenzverteilungen erhält man dann in Form von Potenzreihen, die Spektralmittelwerte (zum Beispiel die Momente) termweise exakt berechnen lassen. Das beweist die Übereinstimmung mit der von der Entwicklung der Mittelwerte ausgehenden funktionentheoretischen Methode. Obwohl die Wahrscheinlichkeit eine nichtnegative Grösse ist, treten bei derartigen Entwicklungen lokal negative Wahrscheinlichkeitsdichten auf, die erst durch selektive Summation über alle Ordnungen (TAKENO[15]), LANGER[16])) verschwinden. Man kann aber auch ausgehend von der Clusterentwicklung durch geeignete Regularisierung Spektralverteilungen mit negativen Wahrscheinlichkeiten, wenigstens in gewissen Parameterbereichen, vermeiden.

Da der Verteilung des Auslenkungsquotienten im Gegensatz zu den Auslenkungen selbst physikalisch keine Bedeutung zukommt, wurde sie nicht näher untersucht. Immerhin steht sie in einem engen Integralzusammenhang mit der Verteilungsfunktion von u_{n-1}, u_n.

Die Beschränkung der Dyson-Schmidt-Gleichung auf eindimensionale Gitter ist grundsätzlich. Man kann jedoch für die Berechnung der Frequenzverteilung ein eindimensionales Modell für ein mehrdimensionales Gitter finden, wenn man sich auf (kubische) Kristalle beschränkt, deren Diagonalwechselwirkung sehr klein ist. Wird dieses Verhältnis nur in erster Ordnung berücksichtigt, so entspricht der Kristall einer linearen Kette, deren Atome zusätzlich harmonisch an den geometrischen Gitterplatz gebunden sind. Das Frequenzspektrum des gewöhnlichen ungeordneten Kristalls wird dadurch ein wenig nach höheren Frequenzen verschoben, während die Lücke am unteren Spektralrand durch Beiträge in höherer Ordnung ausgefüllt wird. Diese Näherung kann physikalisch nur dann brauchbar sein, wenn der Schubmodul klein gegenüber dem Elastizitätsmodul ist.

Herrn Prof. A. Thellung danke ich für wertvolle Hinweise und anregende Diskussionen. Diese Arbeit wurde durch finanzielle Unterstützung seitens des «Schweiz. Nationalfonds» ermöglicht.

Appendix

Induktionsvoraussetzung: Die Ergebnisse (4.19) und (4.20) seien wahr für die Indizes $1, 2, \ldots, n$.

Induktionsbehauptung: Sie gelten dann auch für den Index $n + 1$.

Beweis: V^+_{n+1}, C^+_{n+1} folgen aus der Differenzengleichung

$$V^+_{n+1}(\varrho + \tau) - V^+_{n+1}(\varrho) - C^+_{n+1} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(2\,\beta)^m}{m\,!}\, D_m\, V^+_n(\varrho) \tag{A.1}$$

und der Nebenbedingung

$$V^+_{n+1}(\varrho + \pi) - V^+_{n+1}(\varrho) = 0\,. \tag{A.2}$$

Die rechte Seite von (A.1) wird

$$R^+_{n+1}(\varrho) - C^+_{n+1} = V^+_n\big(\varrho'(\varrho)\big) - V^+_n(\varrho)\,, \tag{A.3}$$

wobei

$$\operatorname{tg}\varrho'(\varrho) = \operatorname{tg}\varrho + 2\beta$$

oder

$$e^{-2i\varrho'(\varrho)} = \frac{-i\beta + (1 - i\beta)\,e^{-2i\varrho}}{1 + i\beta + i\beta\,e^{-2i\varrho}}\,. \tag{A.4}$$

Die notwendige Bedingung (4.9) kann man, da in $R^+(\varrho)$ nur natürliche Potenzen von $e^{-2i\varrho}$ auftreten, umformen:

$$R_0 = R^+(e^{-2i\varrho} = 0)\,. \tag{A.5}$$

Also wird

$$-C^+_{n+1} = V^+_n\Big(e^{-2i\varrho} = \frac{-i\beta}{1 + i\beta}\Big) - V^+_n(e^{-2i\varrho} = 0)\,. \tag{A.6}$$

Der letzte Term verschwindet, da der Hauptminorenquotient einer $n \times n$-Matrix, deren letzte Zeile $a_{nl} = \delta_{ln}$ $(l = 1, 2, \ldots, n)$ ist, wegen bekannten Sätzen über die Berechnung von Determinanten gleich 1 ist.

Ebenso leicht verifiziert man, dass der Hauptminorenquotient unverändert bleibt, wenn man irgendwelche Spalten oder Zeilen mit nicht verschwindenden Konstanten multipliziert; daher stimmt der erste Term mit dem Ergebnis (4.19) für den Index $n + 1$ überein. Damit ist die Induktion für C^+_n bewiesen.

Wir zeigen nun, dass

$$R^+_{n+1}(\varrho) = \sum_{l_1, l_2, \ldots l_n = 1}^{\infty} \frac{1}{\pi} \ln \begin{Vmatrix} 1 + i\beta & i\beta\,e^{il_1\tau} & \ldots & i\beta\,e^{i(l_1 + \cdots + l_n)\tau} & i\beta\,e^{i(l_1 + \cdots + l_n)\tau} \\ i\beta\,e^{il_1\tau} & 1 + i\beta & \ldots & i\beta\,e^{i(l_2 + \cdots + l_n)\tau} & i\beta\,e^{i(l_2 + \cdots + l_n)\tau} \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & i\beta\,e^{il_n\tau} & i\beta\,e^{il_n\tau} \\ i\beta\,e^{i(l_1 + \cdots + l_n)\tau} & i\beta\,e^{i(l_2 + \cdots + l_n)\tau} & \ldots & 1 + i\beta & i\beta \\ -e^{-2i\varrho}\,e^{i(l_1 + \cdots + l_n)\tau} & -e^{-2i\varrho}\,e^{i(l_2 + \cdots + l_n)\tau} & \ldots & -e^{-2i\varrho} & 1 \end{Vmatrix} \tag{A.7}$$

ist, indem wir uns $\exp\big(R^+_{n+1}(\varrho) - C^+_{n+1} + V^+_n(\varrho)\big)$ ausgerechnet denken. Dabei werden durch C^+_{n+1} die Hauptminorenfaktoren kompensiert, welche die $n+2$-te Reihe nicht enthalten, desgleichen von $V^+_n(\varrho)$ diejenigen, welche die $n+1$-te Reihe nicht enthalten. Doppelt kompensierte Terme (sowohl $n + 1$ als auch $n + 2$ nicht enthaltend) treten als reziproke Faktoren wieder auf. Die Übereinstimmung des Produktes der Restfaktoren mit $\exp V^+_n\big(\varrho'(\varrho)\big)$ folgt aus der Gültigkeit der Determinantenbeziehung:

$$
\begin{vmatrix}
1+i\beta & i\beta\, e^{il_1\tau} & \dots & i\beta\, e^{i(l_1+\dots+l_n)\tau} & i\beta\, e^{i(l_1+\dots+l_n)\tau} \\
i\beta\, e^{il_1\tau} & 1+i\beta & \dots & i\beta\, e^{i(l_2+\dots+l_n)\tau} & i\beta\, e^{i(l_2+\dots+l_n)\tau} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
i\beta\, e^{i(l_1+\dots+l_n)\tau} & i\beta\, e^{i(l_2+\dots+l_n)\tau} & \dots & 1+i\beta & i\beta \\
-e^{-2i\varrho}\, e^{i(l_1+\dots+l_n)\tau} & -e^{-2i\varrho}\, e^{i(l_2+\dots+l_n)\tau} & \dots & -e^{-2i\varrho} & 1
\end{vmatrix}
$$

$$
= \begin{vmatrix}
1+i\beta & \dots & i\beta\, e^{i(l_1+\dots+l_{n-1})\tau} & i\beta\, e^{i(l_1+\dots+l_n)\tau} \\
i\beta\, e^{il_1\tau} & \dots & i\beta\, e^{i(l_2+\dots+l_{n-1})\tau} & i\beta\, e^{i(l_2+\dots+l_n)\tau} \\
\vdots & & \vdots & \vdots \\
i\beta\, e^{i(l_1+\dots+l_{n-1})\tau} & \dots & 1+i\beta & i\beta\, e^{il_n\tau} \\
\left(i\beta-(1-i\beta)\, e^{-2i\varrho}\right) e^{i(l_1+\dots+l_n)\tau} & \dots & \left(i\beta-(1-i\beta)\, e^{-2i\varrho}\right) e^{il_n\tau} & 1+i\beta+i\beta e^{-2i\varrho}
\end{vmatrix} . \qquad \text{(A.8)}
$$

Aus R^+_{n+1} folgt die iterative Lösung

$$
V^+_{n+1}(\varrho) = \sum_{l_{n+1}=1}^{\infty} R^+_{n+1}(\varrho - l_{n+1}\,\tau) \qquad \text{(A.9)}
$$

die nach der Umformung mit dem oben erwähnten Satz über Hauptminorenquotienten in die Gestalt (4.20) für den Index $n+1$ gebracht werden kann. Damit ist auch die Induktion für $V^+_n(\varrho)$ bewiesen. Wegen der Verankerung der Induktion für $n = 1$ durch die Resultate (4.14) und (4.18) ist der Beweis für die allgemeine Lösung (4.19) und (4.20) geliefert.

Referenzenliste

[1]) E. W. Montroll, R. B. Potts, Phys. Rev. *102*, 72 (1956).
[2]) I. M. Lifschitz, C. I. Stepanova, Soviet Phys. JETP *3*, 656 (1956).
[3]) C. Domb, A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss, Phys. Rev. *115*, 18, 24 (1959).
[4]) E. W. Montroll, J. Chem. Phys. *10*, 218 (1942); *11*, 481 (1943).
[5]) J. Pirenne, Physica *24*, 73 (1958); *27*, 385 (1961).
[6]) W. A. Schlup, Helv. Phys. Acta *36*, 41 (1963).
[7]) J. Hori, Prog. Theor. Phys. *23*, 475 (1960).
[8]) P. Dean, Proc. Roy. Soc. A *254*, 507 (1960); *260*, 263 (1961); Proc. Phys. Soc. *73*, 413 (1959).
J. L. Martin, Proc. Roy. Soc. A *260*, 139 (1961).
P. Dean, J. L. Martin, Proc. Roy. Soc. A *259*, 409 (1960).
[9]) R. F. Wallis, A. A. Maradudin, Prog. Theor. Phys. *24*, 1055 (1960).
[10]) H. Schmidt, Phys. Rev. *105*, 425 (1957).
[11]) F. J. Dyson, Phys. Rev. *92*, 1331 (1952).
[12]) R. Bellman, Phys. Rev. *101*, 19 (1956).
[13]) J. J. Des Cloizeaux, J. Phys. Rad. *18*, 131 (1957).
[14]) J. Aczél, *Vorlesungen über Funktionalgleichungen und ihre Anwendungen* (Birkhäuser, Basel 1961).
[15]) S. Takeno, Prog. Theor. Phys. *25*, 102 (1961).
[16]) J. S. Langer, J. Math. Phys. *2*, 584 (1961).