

13. 1次元無秩序系における eigenmodes の localization について (電子計算機)

北大理 堀 淳一
群馬大工 南 栄

Phase theory ¹⁾ の立場から disordered one dimensional system について予想されるいくつかの points がある。これらを computer により数値的に検証するのが目的である。まず理論の概要を述べつつ points を示し、次にこれらの points の計算機処理について簡単にふれ、その結果を示し、最後に結論を述べる。

理論の概要 1次元 chain を transfer matrix の方法で取扱う。ある site の state vector $X = (x, y)^T$ は transfer matrix Q により next site state-vector $X' = (x', y')^T$ へ変換される。すなわち

$$X' = QX \quad (1)$$

ここに

$$Q = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad (2)$$

であり, nearest neighbor harmonic interaction が仮定されている。state-ratio Z 及び phase δ は次のように定義される。

$$Z = x/y = e^{i\delta} \quad (3)$$

State-ratio 間の変換関係は

$$Z' = \frac{AZ + B}{B^*Z + A^*} \quad (4)$$

で与えられることは (1), (2) より容易に分る。

(4)式を Z で微分して

1次元無秩序系における eigenmodes の localization について (電子計算機)

$$\frac{d\delta}{d\delta'} = |Az+B|^2 = \frac{|x'|^2 + |y'|^2}{|x|^2 + |y|^2} = \frac{\|X'\|^2}{\|X\|^2} \quad (5)$$

を得る。この式は $d\delta/d\delta' \leq 1$ に従って statevector が縮んだり、伸びたりすることを示している。この関係は Fig. 1 により明瞭となる。

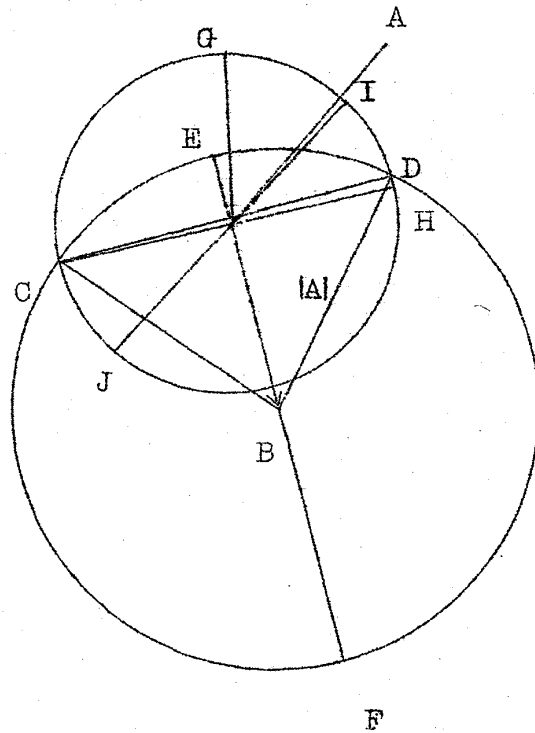


Fig. 1

すなわち単位円上の Z は変換 $Az+B$ により円 CDF 上の 1 点に対応する。弧 $G I H$ は弧 $C E D$ へ、弧 $G J H$ は弧 $C F D$ へ map され、前者の場合は $|Az+B| < 1$ となり、後者の場合は > 1 となる。従って弧 $G I H$ は縮む領域 (S-region) であり、弧 $G J H$ は伸びる領域 (L-region) ということになる。L-region は広く、S-region はせまいことに注意する。

1つの chain を考え、その上での phase distribution を $f(\delta)$ とする。 $\ln(d\delta/d\delta')$ の平均値

$$\bar{L} = \int_0^{2\pi} f(\delta) \ln(d\delta/d\delta') d\delta \quad (6)$$

を sample degree of localization と呼ぶことにする。この量は考えている系の eigenmode の localization の measure を与えるものとして知られる。Chain が regular lattice ならば、ただ1つの transfer matrix Q で記述され、その eigenmode は localize しないことが知られている。この場合は、

$$\bar{L} = 0 \quad (7)$$

である。

我々が取扱うのは mass が m_0 と m_1 ($m_0 < m_1$) の isotopes から成る diatomic chain で randomly disordered で equal concentration のものである。Light atom m_0 を標準にとるとそこでの transfer matrix $Q^{(0)}$ は

$$Q^{(0)} = \begin{pmatrix} e^{2i\beta} & 0 \\ 0 & e^{-2i\beta} \end{pmatrix} \quad (8)$$

となり、heavy atom のところでの transfer matrix $Q^{(1)}$ は、

$$Q^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cc} (1+iQ \tan\beta) e^{2i\beta} & iQ \tan\beta e^{-2i\beta} \\ -iQ \tan\beta e^{2i\beta} & (1-iQ \tan\beta) e^{-2i\beta} \end{array} \right\} \quad (9)$$

となる。ただし Q は mass ratio parameter であり、

$$Q = m_1/m_0 - 1 \quad (10)$$

により、 β は wave - number parameter であり

$$\omega^2 = \frac{4K}{m_0} \sin^2\beta \quad (11)$$

1次元無秩序系における eigenmodes の localization について (電子計算機)

によって定義される。K は force-const. である。

$Q^{(0)}$ - transfer については(5)式より

$$d\delta/d\delta' = |z e^{2i\beta}|^2 = 1 \quad (12)$$

であって L-region も S-region も存在しないが, $Q^{(1)}$ については存在する。

δ から δ' への変換は $Q^{(0)}$ については

$$\delta' = \delta + 4\beta \quad (13)$$

で, $Q^{(1)}$ については

$$e^{i\delta'} = \frac{A e^{i\delta} + B}{B^* e^{i\delta} + A^*} \quad (14)$$

で与えられる。ここに

$$A = (1 + iQ \tan \beta) e^{2i\beta} \quad (15)$$

$$B = iQ \tan \beta e^{-2i\beta} \quad (16)$$

である。

話は少し前に戻って regular lattice の場合, $L=0$ であることは, Fig. 1 で $d\delta/d\delta' < 1$ なる領域ではその逆の領域に比し $f(\delta)$ がより大きな値をもっている。このことは state ratio が S-region にくる頻度が L-region にくるそれより高いように調節されているのだと解される。

ところが light impurity が混じると, そこでは state-ratio は常に constant step 4β だけとぶので, 上述の調節は多少不如意となる筈である。それだけ $f(\delta)$ は S-region においては値を減じ, L-region においては値を増すことになって, 結果として L は正となる筈である。かくして localized eigenmodes が期待されるわけである。Parameters Q, β のいろいろな

組に対して Σ はどのような値をとるかということは 1 つの point である。

すでに述べたような chains の ensemble を考える。任意の initial phase density $\rho_0(\delta)$ から出発して transferring process を経たとき unique な limiting stationary density $\rho_\infty(\delta)$ に達するものかどうか、これも 1 つの point である。

Light atom の現われる確率を仮に p とし (我々の場合は $p \doteq 0.5$ であるが), ensemble 上では phase が確率 p で (13) 式の変換を, 確率 $(1-p)$ で (14) 式あるいはそれを書き直した

$$\delta' = F(\delta) \quad (17)$$

なる変換をうけると考えれば phase density に対する変換は

$$\rho_{n+1}(\delta) = p\rho_n(\delta - 4\beta) + (1-p)\rho_n(G(\delta)) \frac{dG(\delta)}{d\delta} \quad (18)$$

とかけるだろう。ここに G は (17) 式を逆にといたもので

$$\delta = G(\delta') \quad (19)$$

である。Stationarity の判定は $0 \leq \delta < 2\pi$ なるあらゆる δ に対して

$$|\rho_{n+1}(\delta) - \rho_n(\delta)| \leq 10^{-4} \times \rho_{n+1}(\delta) \quad (20)$$

なる条件がみたされることをもってし, そのときの $\rho_{n+1}(\delta)$ を $\rho_\infty(\delta)$ とみなす。以下これを単に $\rho(\delta)$ とかく。また $\rho_n(\delta)$ は常に規格化条件

$$\int_0^{2\pi} \rho_n(\delta) d\delta = 1 \quad (21)$$

に従うものとする。すでに現われた 1 つの chain 上の phase distribution $f(\delta)$ も同様に規格化するものとする。

任意の Q, β の組に対して上のようにしてえられる $\rho(\delta)$ と sample chain 上での $f(\delta)$ とを比較し, それらの一致をみることによって phase distribution のエルゴード性を確かめることもまた 1 つの point である。

Computation 個々の sample chain は計算機の特性を利用して擬似乱

1次元無秩序系における eigenmodes の localization について (電子計算機)

数列を発生させることにより極めて容易に作りうる。乱数列

$$\{r_n\} \quad (0 < r_n < 1; n = 0, 1, \dots, N) \quad (22)$$

を作る際の初期値 r_0 のえらび方によって異った乱数列すなわち異った sample chain をうる。数列(22)の項と chain 上の atom との対応は次のようにした。

$$r_n \leq 0.5 \quad \longleftrightarrow \quad \text{light atom } m_0,$$

$$r_n > 0.5 \quad \longleftrightarrow \quad \text{heavy atom } m_1.$$

我々の chain は 10000 atoms を含むものである ($N = 10000$)。 (出来上った chain を H, L のような文字によって output してみることも容易である。)

1つの sample 上で phase の初期値 δ_0 を適当にきめ、一方のはじから m_0 あるいは m_1 に応じて(13)式あるいは(14)式の変換を施すことによってえられた δ の値が $\Delta\delta = 2\pi/M$ なる単位区間できざまれたどの区間に落ちたかを computer に記憶させ、こうして最終的にえられる各区間に対する δ の頻度値を知れば、これすなわち phase distribution $f(\delta)$ である。こうすればすでにのべた $f(\delta)$ に対する規格化条件は

$$\sum_{i=1}^M f(\delta_i) \Delta\delta_i = 1 \quad (23)$$

となる。我々は $M = 200$ とした。かくして $f(\delta)$ は単位区間 $2\pi/200$ の histogram で表わされることになるが、我々はその値を単位区間の左端に対して plot するやり方で後に図示した。($\rho(\delta)$ に対しても同様にした。)

Sample degree of localization Σ はこの $f(\delta)$ が求まれば容易に計算できるわけと言及を要しないだろう。

Ensemble phase density $\rho(\delta)$ の計算は(18)式以降に述べた所によるが、実際問題としては見かけよりはるかにうるさい。(18)式右辺才1項に関する限りは造作もないが、事才2項に関しては問題である。この才2項の部分に限って処理方法について簡単にのべる。

変換前の δ -space および変換後の δ' -space をともに等間隔区間にきざんで、それぞれの分点数を等しくえらんでおけば、その分点数を増すことによりいくらでも精度よく計算出来る筈と考えられるが、それはちがう。Jacobian が原因となって変換毎に規格化条件(2)をくるわすからである。変換の linearity からのずれが大きいほどこのくるいは大きい。そこで工夫が必要となる。 $Q=1, \beta=3\pi/8$ の場合について illustrate しよう (Fig. 2)。

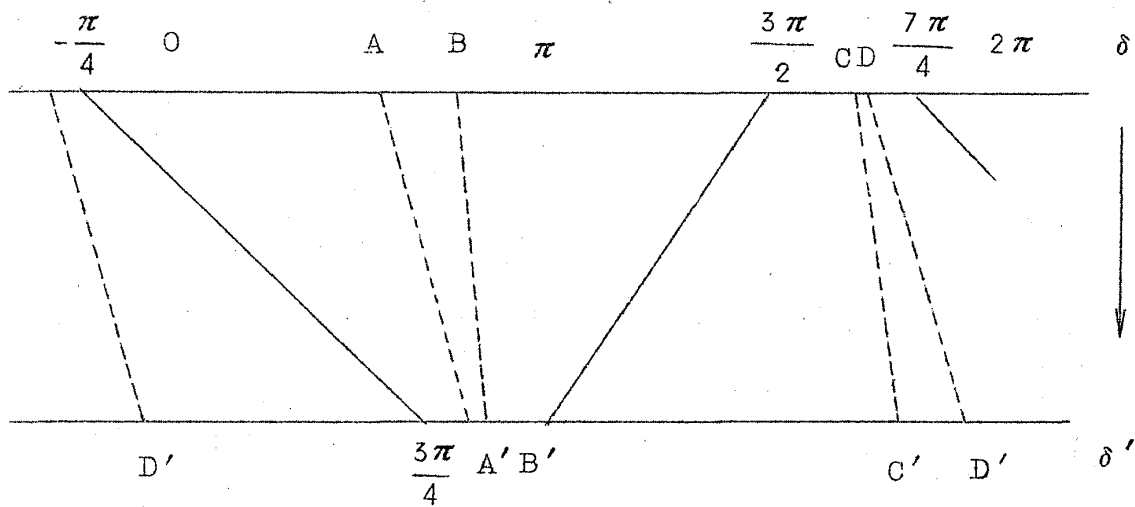


Fig. 2

図の δ - および δ' -space を結びつける実線上では $d\delta/d\delta' = 1$ であるが、破線 AA' , BB' を含む領域では $d\delta/d\delta' > 1$ で、破線 CC' , DD' を含む領域では $d\delta/d\delta' < 1$ である。しかもそれぞれの領域の中央ほどその比は 1 と大きくちがってくる。そこで A, B を含む δ -space の領域 $(-\pi/4, 3\pi/2)$ は等分割して各分点に対応して変換(1)により $A \rightarrow A'$, $B \rightarrow B'$ のように不等間隔分点 A', B' 等を定める。残った領域に対してはその逆を $C' \rightarrow C, D' \rightarrow D$ の様に(1)式によって C, D 等を定める。こうすれば今考えている変換は例えば AB, CD 上のたんざくを面積不変のまま $A'B', C'D'$ 上へそれぞれ移すという極めて単純な作業に転化される。規格化条件は当然保証され、精度は等分割の分点数に depend することになる。我々はこれを 100 にえらんだ。こうした変換を(2)式が充たされるまで繰返してゆくについては、尙まだうるさい手続が必要だが、それは省く。

計算結果 以下結果は図および表とともに示す。

I. Sample phase distribution $f(\delta)$ について

- (i) $Q = 1$, $\beta = 0.95531662$ (impurity frequency) の場合につき, 5 sample chains (Nos. 1~5) について initial phase $\delta_i = 0$ より出発して正変換 (forward transfer) を行なった結果, いずれも非常に似た分布を得た。
- (ii) (i) の場合の sample chain No. 3 ($p = 0.5007$) につき今度は δ_i を $2\pi \times (i/10)$ ($i = 1, 2, \dots, 9$) の9通りに変化させて $f(\delta)$ を求めた結果はやはりいずれも非常によく似たものであった。しかも9901番目から10000番目までの atoms のところの phase values を output した結果は, いずれの場合もすべて一致していることが分った。このことは phase は変換をうけるに従い初期値を忘れる傾向をもつと解される。また(i), (ii) を通じていえることは $f(\delta)$ は sample にも initial phase にもよらなかったことである。(ii) ではいずれの場合も $\bar{L} \doteq 0.448$ であった。
- (iii) $Q = 1$, $\beta = 3\pi/16$, $\delta_i = 0$ で sample chain No. 3 で forward transfer を行なった結果は Fig. 3 である。ここでは $\bar{L} \doteq 0.091$ であった。

II. Ensemble phase density $\rho(\delta)$ について

- (i) $Q = 1/2$, 1, 2, 3 の各々について $\beta = \pi/8, 3\pi/16, \pi/4, 5\pi/16, 3\pi/8, 11\pi/26$ の合計 24 通りの場合について, $p = 0.5$ として $\rho_0(\delta) = 1/2\pi$ より出発して forward transfer を行なった結果は Q, β の小さな値に対しては曲線は起伏が少く, 値が大きくなるにつれて起伏ははげしくなる。それにつれて ensemble degree of localization

$$\langle L \rangle = \int_0^{2\pi} \rho(\delta) \ell_n(d\delta/d\delta') d\delta \quad (24)$$

の値は大きくなる。

$Q = 1/2$, $\beta = 3\pi/16$ の場合を Fig. 4,

$Q = 1$, $\beta = 3\pi/16$ \curvearrowright Fig. 5,

$Q=2$, $\beta=3\pi/16$ の場合を Fig. 6,

$Q=1$, $\beta=\pi/4$ " Fig. 7,

に示した。

$\langle L \rangle$ の値を表 1 に示す。

$\beta \backslash Q$	$1/2$	1	2	3
$\pi/8$	0.018	0.065	0.231	0.388
$3\pi/16$	0.051	0.185	0.890	1.822
$\pi/4$	0.127	0.936	2.187	2.766
$5\pi/16$	0.532	1.369	2.881	3.805
$3\pi/8$	1.219	2.712	3.982	4.726
$11\pi/26$	2.487	3.569	4.828	5.606

表 1

(ii) $Q=1$, $\beta=3\pi/8$, $p=0.5$ で $\rho_0(\delta)$ を Dirac の delta 関数型, といっても $(\delta_s, \delta_s + \Delta\delta_s)$ の区間でのみ $\rho_0 = C_s = 1/\Delta\delta_s$ であってその他では zero であるとして, いくつかの δ_s と $\Delta\delta_s$ について forward transfer を試みた結果は(i)でえられた $\rho(\delta)$ と殆んど変らなかった。このことは $\rho_0(\delta)$ のいかに関せず unique な $\rho(\delta)$ がえられることを意味する。

(iii) $Q=1$. β は(i)と同じく 6 通りの場合について $p=0.5$, $\rho_0(\delta) = 1/2\pi$ から出発して逆変換 (backward transfer) を行なった結果, (i)の対応する場合の鏡映にあたるものがえられた。このことは一般的に証明することも容易である。

$\beta=3\pi/16$, $\pi/4$ の 2 つの場合をそれぞれ Figs. 8, 9 に示す。

(iv) $Q=1$, $\beta = \text{impurity frequency}$, $p=0.5007$ (sample chain No. 3 に対応する). $\rho_0(\delta) = 1/2\pi$ より forward transfer した結果は I の(i)あるいは(ii)でえられた対応する $f(\delta)$ において neighboring 3 values の平均値をもって中央の値をおきかえる操作を施してえ

1次元無秩序における eigenmodes の localization について (電子計算機) られる $f(\delta)$ とよく一致することがたしかめられた。 $\langle L \rangle$ の値は 0.978 であった。尚この関係は Fig. 3 と Fig. 5 に示した場合についてもいえる。このことは $\rho(\delta)$ の計算法の性質上かなりの smoothing が行なわれているためと考えられる。この計算の際の分点数を増せば $f(\delta)$ との直接的な一致が改善されるだろう。

結 論 Sample degree of localization \bar{L} と ensemble deg. of loc. $\langle L \rangle$ を比べると前者はほぼ後者の半分であるが、それは(6)式の計算に当って $l_n(d\delta/d\delta')$ に寄与するのは heavy atom のところだけであるのに $f(\delta)$ の中には light atom のところの分も算入されているためである。しかしそれでも尚、例えば I の(III)における $\bar{L} \times 2$ と表 1 における対応する値 $\langle L \rangle = 0.185$ とを比べても前者は小さい。これは 1 つには sample fluctuation も考えられるかもしれないが、主に II の(IV)の終りに述べたように $\rho(\delta)$ が oversmoothing をうけているためであろう。これもまた $\rho(\delta)$ の計算に際して分点数を増すことによって改善されるだろう。

以上のことを考慮すれば $f(\delta)$ と $\rho(\delta)$ の一致並びに $2\bar{L}$ と $\langle L \rangle$ との一致も充分とみなしうる。従って我々は次の様に結論できる。

- (i) phase theory で記述しうる isotopically disordered chains に関しては ergode 性が成立し、かつ unique な ensemble phase density が存在する。
- (ii) Frequency β の増大につれて $\langle L \rangle$ も増すので、それだけ強く eigenmodes が localize することが示された。

付 言 詳細な報告は近く発表の予定である。この計算は東京大学大型計算機センターの HITAC 5020 によって行なわれた。プログラムは HARP 5020 (FORTRAN IV) である。計算処理部分 (プログラムも含めて) の詳細の報告も考慮中である。

文 献

1) J. Hori, Prog. Theoret. Phys. Suppl. No. 36 (1966) 3.

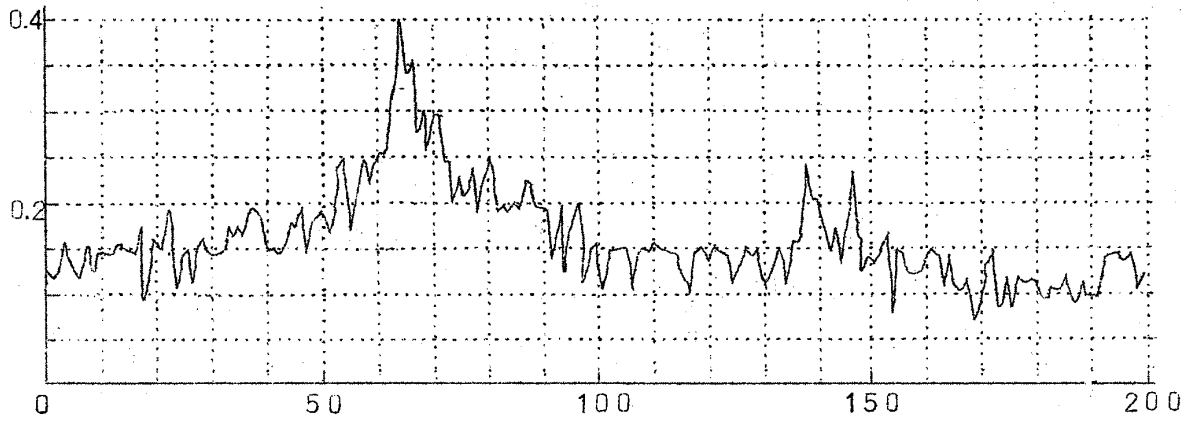


Fig. 3 $f(\delta)$ [$Q=1, \beta=3\pi/16, \delta_i=0$], $\Sigma=0.091$.

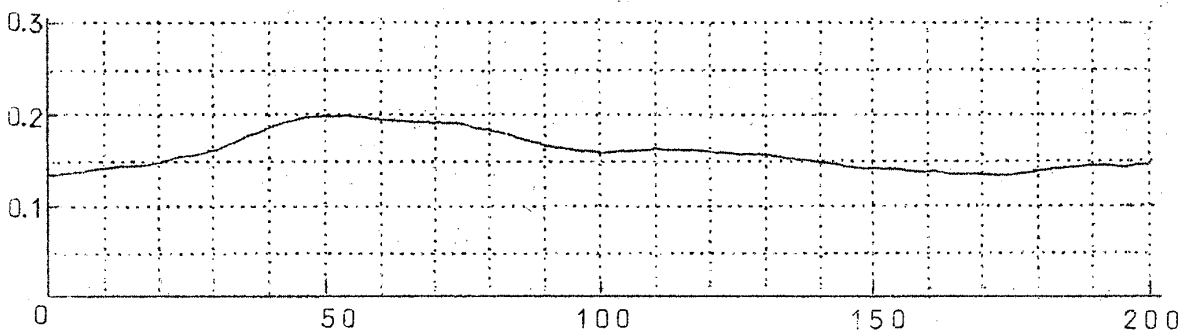


Fig. 4 $\rho(\delta)$ [$Q=1/2, \beta=3\pi/16$]

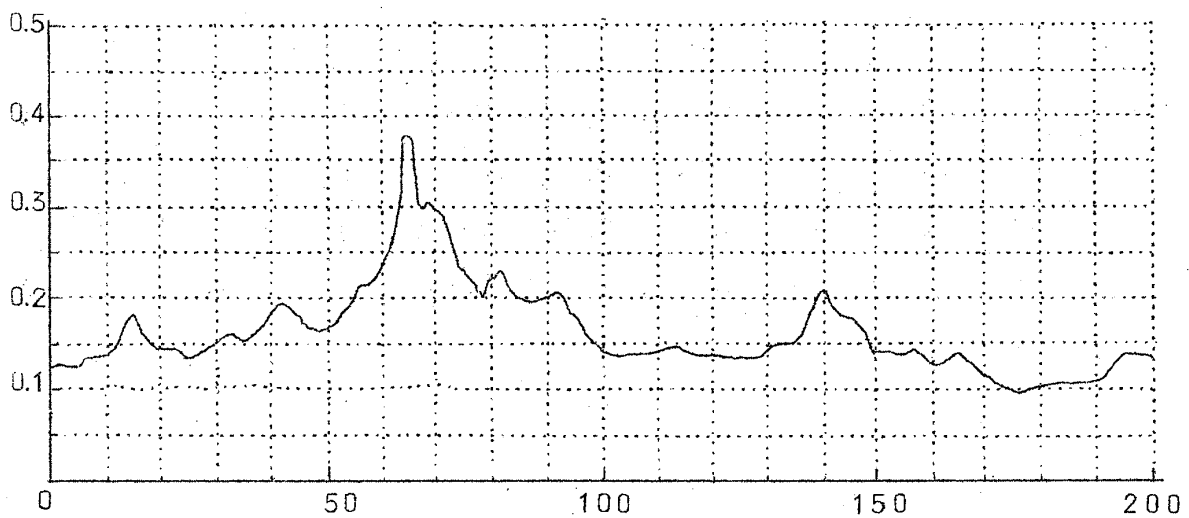


Fig. 5 $\rho(\delta)$ [$Q=1, \beta=3\pi/16$]

1次元無秩序系における eigenmodes の localization について (電子計算機)

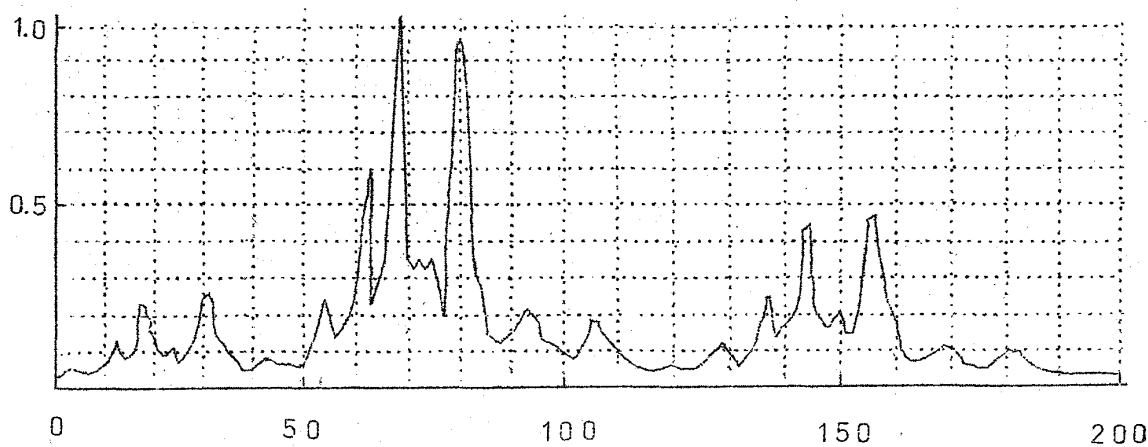


Fig. 6 $\rho(\delta)$ [$Q=2, \beta=3\pi/16$]

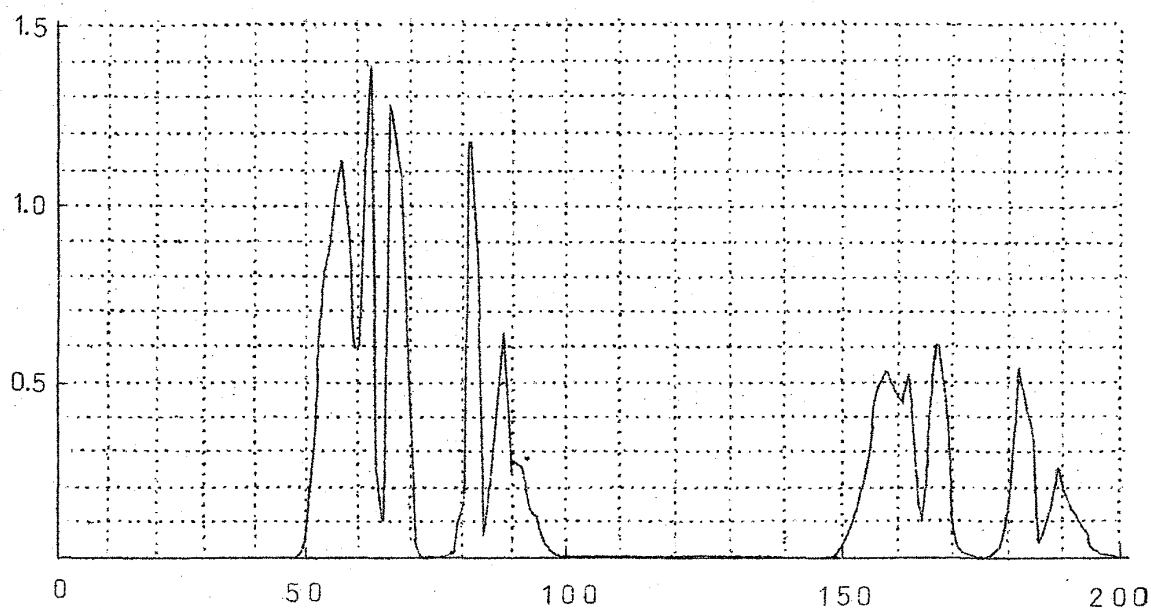


Fig. 7 $\rho(\delta)$ [$Q=1, \beta=\pi/4$]

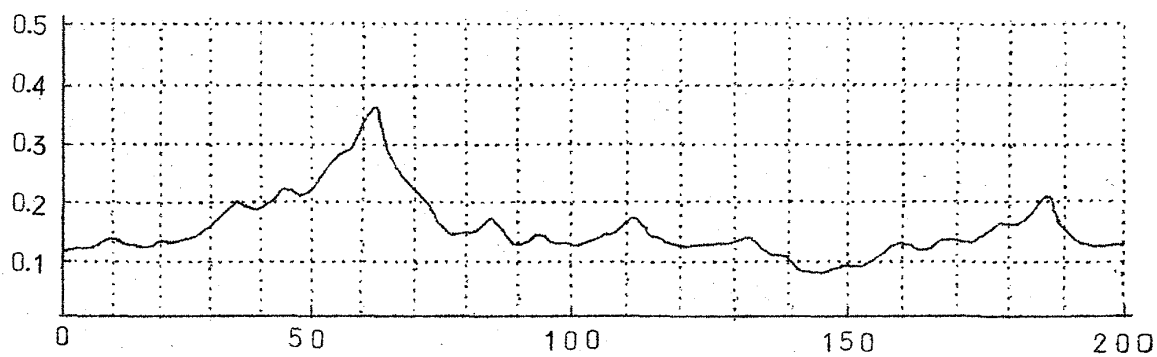


Fig. 8 $\rho(\delta)$ [$Q=1, \beta=3\pi/16$] backward.

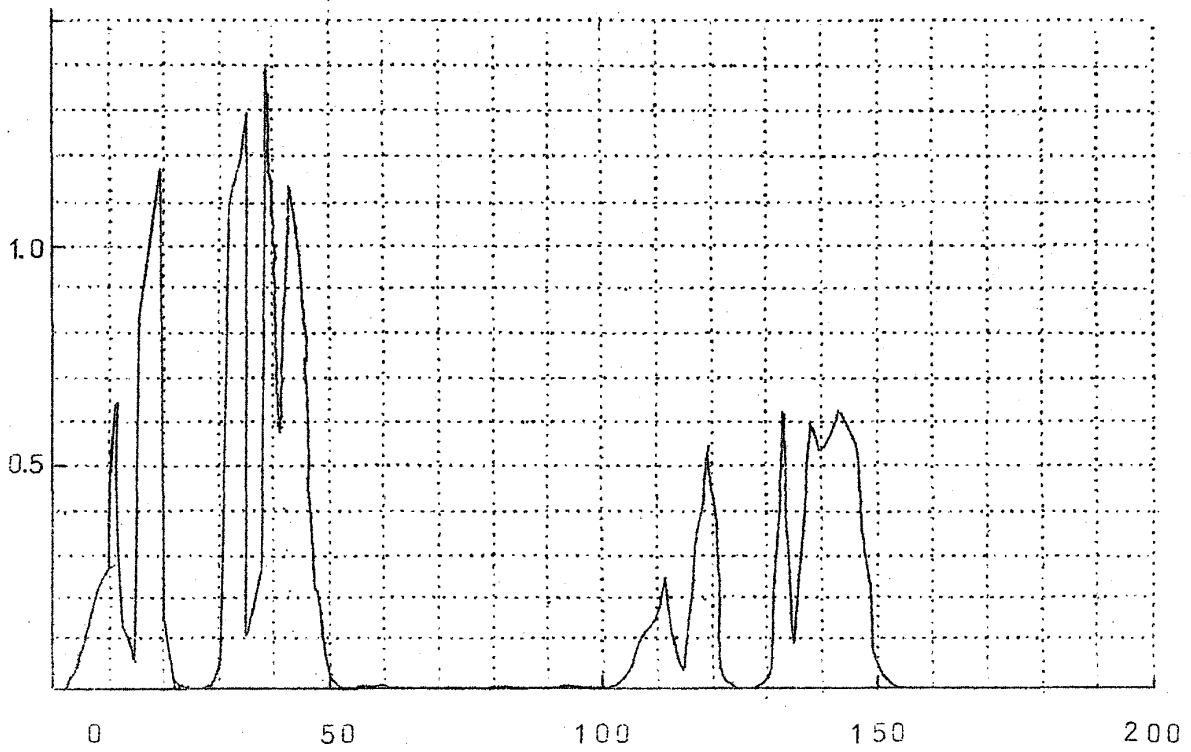


Fig. 9 $\rho(\delta)$ [$Q = 1, \beta = \pi/4$] backward.

追記 Figs. 3 ~ 9 の横軸の単位は $2\pi/200$ である。