

1次元無秩序結晶内における波の減衰と 固有モードの局在化との関係

堀 淳 一 (北大理)

(4月4日受理)

1)

最近 Rubin は、1次元の無秩序同位原子格子に外から平面波を送りこむと、それは必ず指数函数的に減衰することを示した。一方このような格子の固有モードは一般に局在化していることが知られている。²⁾⁻⁵⁾ この2つの事実の間には密接な関連のあることが予想されるが、このノートでは実際そうであることを示す。

1. Rubin の理論の概要

Rubin の論文はまだ印刷になっていないので、まずその大略をここで紹介しよう。最近接調和相互作用をもつ無限に長い1次元結晶を考える。粒子の番号を r ($-\infty < r < \infty$) とし、 $r = A_j$, $j = 1, 2, \dots, N$ にある N 個の同位不純物原子 (質量 M) をのぞいて、すべての原子の質量は m であるとする。さらに $A_1 = 0$, $0 = A_1 < \dots < A_j < \dots < A_N$ とし、隣接する不純物の間の距離は独立な確率分布に従って、分布しているものと仮定する。

力の常数を K , r 番目の粒子の質量を m_r とかき、 $Q_r \equiv (m_r - m)/m$ 及び reduced time $\tau \equiv 2(K/m)^{1/2} t$ を導入すると、この格子の運動方程式は

$$(1+Q_r) \ddot{x}(r, \tau) = \frac{1}{4} [x(r-1, \tau) - 2x(r, \tau) + x(r+1, \tau)] \quad (1)$$

である。Rubin は初期条件

$$\begin{aligned} x(r, 0) &= \begin{cases} 0, & r > -R, \\ e^{-ikr}, & r \leq -R, \end{cases} \quad R > 0, \\ x_\tau(r, 0) &= \begin{cases} 0, & r > -R, \\ i\omega e^{-ikr}, & r \leq -R, \end{cases} \quad \omega = \sin \frac{k}{2} \end{aligned} \quad (2)$$

をみたす (1) の解の, $t \rightarrow \infty$ における漸近形を求め, それから $r > A_N$ における波の振巾 $J_N(\omega)$ を計算した, $J_N(\omega)$ は $0 \leq r \leq A_N$ における不純物の配置及び ω, Q の函数であるが, N が十分大きいときには ω, Q 及び不純物の濃度 c によってきまることが期待される。そこで

$$J_N(\omega) = \exp \{ -N \alpha_N(\omega, Q, c) \} \quad (3)$$

とおくと, $\alpha_N(\omega, Q, c)$ は

$$\alpha_N(\omega, Q, c) = -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ell_n(|g_n|) \quad (4)$$

という形に表わされることが示される。但し g_n は $g_1 = \delta^{-1}$ から

$$g_n = [\delta + (\delta - g_{n-1}) \exp(-2a_n k_i - 2\phi i)]^{-1} \quad (5)$$

という漸化式によって次々に生成される量である。ここで

$$1 + i\Delta \equiv \delta e^{i\phi}, \quad (\delta: \text{実数}) \quad (6)$$

$$\Delta \equiv Q\omega(1-\omega^2)^{-1/2}, \quad (7)$$

$$a_n \equiv A_n - A_{n-1} \quad (8)$$

である。さらに

$$g_n = \delta + \Delta h_n \quad (9)$$

で定義される量 h_n を導入すると, h_n は双一次変換

$$h_n = -\frac{\Delta + \delta h_{n-1} \exp(\Omega_n i)}{\delta + \Delta h_{n-1} \exp(\Omega_n i)} \quad (10)$$

によって変換される量であることがわかる。但し $\Omega_n \equiv \pi - 2(a_n k + \phi)$

Rubin は表式 (4) を用いて,

(1) c が十分小さいときには, $N \rightarrow \infty$ で $\alpha_N(\omega, Q, c)$ はある正の値よりも大きい,

(2) 特殊振動数 (special frequency, SF) のところでは, $Q \geq$

Q_{crit} ならば $\alpha_N(\omega, Q, c)$ の極限值は任意の濃度 c に対して正である,

(3) $\alpha_N(\omega, Q, c) > 0$ ならば, $N \rightarrow \infty$ で $|h_N| \rightarrow 1$ となる, ことを示した。 $\alpha_N(\omega, Q, c)$ がつねに正であることは証明されていないが, 上の結果と α_N に対する数値計算の結果とから, Rubin はこれを conjecture として提出している。

2. Phase Theory との関係

上に現われた双一次変換 (10) と, phase theory⁶⁾ で出てくる双一次変換との関係をしらべてみよう。まず $r=0$ に唯 1 個の不純物がある場合を考える。運動方程式は

$$\begin{aligned} m\omega^2 x_r + K[x_{r+1} + x_{r-1} - 2x_r] &= 0, \quad r \neq 0, \\ M\omega^2 x_0 + K[x_1 + x_{-1} - 2x_0] &= 0, \quad r=0 \end{aligned} \quad (11)$$

今

$$\begin{aligned} x_r &= I_0 e^{2i\beta r} + R_0 e^{-2i\beta r}, \quad r \leq 0, \\ x_r &= I_1 e^{2i\beta r} + R_1 e^{-2i\beta r}, \quad r \geq 0 \end{aligned} \quad (12)$$

とおく, I, R はそれぞれ進行波と後退波の振幅を表わす。 β と ω の間にはいうまでもなく質量 m の原子からなる規則格子の分散関係

$$m\omega^2 = 4K \sin^2 \beta \quad (13)$$

がなりたつ,

$r=0$ での連続性の条件から

$$I_0 + R_0 = I_1 + R_1 \quad (14)$$

(11) ~ (14) から,

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ R_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_0 \\ R_0 \end{pmatrix} \equiv A \begin{pmatrix} I_0 \\ R_0 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \frac{f - e^{-2i\beta}}{i \sin 2\beta}, & A_{12} &= \frac{f - \cos 2\beta}{i \sin 2\beta}, \\
A_{21} &= \frac{-K + \cos 2\beta}{i \sin 2\beta}, & A_{22} &= \frac{-K + e^{2i\beta}}{i \sin 2\beta},
\end{aligned} \quad (16)$$

$$f \equiv \cos 2\beta - 2Q \sin^2 \beta \quad (17)$$

という関係のあることがわかる。⁷⁾ (12)の代りに

$$\begin{aligned}
x_r &= I_0(r) + R_0(r), & r &\leq 0, \\
x_r &= I_1(r) + R_1(r), & r &\geq 0
\end{aligned} \quad (18)$$

という表示を用いるならば,

$$\begin{pmatrix} I_1(1) \\ R_1(1) \end{pmatrix} = Q^{(0)} \begin{pmatrix} I_0(0) \\ R_0(0) \end{pmatrix} \equiv Q \begin{pmatrix} I_1(0) \\ R_1(0) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} I_1(r) \\ R_1(r) \end{pmatrix} = Q^{(0)} \begin{pmatrix} I_1(r-1) \\ R_1(r-1) \end{pmatrix}, \quad r > 2$$

$$\begin{pmatrix} I_0(r) \\ R_0(r) \end{pmatrix} = Q^{(0)} \begin{pmatrix} I_0(r-1) \\ R_0(r-1) \end{pmatrix}, \quad r \leq 0$$

となる。但し

$$Q^{(0)} \equiv \begin{pmatrix} e^{2i\beta} & 0 \\ 0 & e^{-2i\beta} \end{pmatrix} \quad (22)$$

$$Q = \begin{pmatrix} (1 + iQ \tan \beta) e^{2i\beta} & iQ \tan \beta e^{-2i\beta} \\ -iQ \tan \beta e^{2i\beta} & (1 - iQ \tan \beta) e^{-2i\beta} \end{pmatrix} \quad (23)$$

で、それぞれ質量 m 及び M の原子のところの伝達行列である。

上では進行波を $Ie^{2i\beta r}$ と考えているが、Rubin の論文では進行入射波を $e^{-ikr} e^{i\omega t}$ と表わしている。従って Rubin の証法と我々の証法との対

応は次のようになる：

Rubin	Phase Theory
$\Delta \equiv Q\omega(1-\omega^2)^{-1/2}$	$-Q\omega(1-\omega^2)^{-1/2} = -Q \tan \beta \equiv -\tan r$
$\delta = \sqrt{1+\Delta^2}$	$\sqrt{1+Q^2 \tan^2 \beta} = \sqrt{1+\tan^2 r} = \sec r$
$\tan \phi = \Delta$	$-\tan r$
ϕ	$-r$

この表を用いて(10)式をかきかえると、

$$\begin{aligned}
 i e^{ir} h_n &= \\
 &= \frac{(1+i \tan r) e^{2i\beta a_n} i h_{n-1} e^{ir} + i \tan r e^{-2i\beta a_n}}{-i \tan r e^{2i\beta a_n} i h_{n-1} e^{ir} + (1+i \tan r) e^{-2i\beta a_n}} \\
 &\equiv \frac{Q_{11}^{(a_n)}(i h_{n-1} e^{ir}) + Q_{12}^{(a_n)}}{Q_{21}^{(a_n)}(i h_{n-1} e^{ir}) + Q_{22}^{(a_n)}} \quad (24)
 \end{aligned}$$

となる。但し $Q_{ij}^{(a_n)}$ は $(n-1)$ 番目の不純物から n 番目の不純物への伝達行列 $Q^{(a_n)} \equiv Q\{Q^{(0)}\}^{a_n-1}$ の行列要素である。(24)は、 $i e^{ir} h_n$ という量が n 番目の不純物のところの複素状態比 z_n と同じものであることを意味している：

$$z_n \equiv i e^{ir} h_n \quad (25)$$

同様にして g_n は

$$\begin{aligned}
 g_n &= e^{-ir} e^{-2i\beta a_n} \left[-i \tan r z_{n-1} e^{2i\beta a_n} \right. \\
 &\quad \left. + (1-i \tan r) e^{-2i\beta a_n} \right]^{-1} \quad (26)
 \end{aligned}$$

となることがわかる。従って

$$\begin{aligned}
 |g_n|^2 &= \frac{1}{|-i \tan r e^{2i\beta a_n} z_{n-1} + (1-i \tan r) e^{-2i\beta a_n}|^2} \\
 &= \frac{1}{|Q_{21}^{(a_n)} z_{n-1} + Q_{22}^{(a_n)}|^2}
 \end{aligned} \tag{27}$$

3. 固有モードの局在化と波の減衰との関係

4) 5) Hori-Minami は、複素状態比 $z \equiv \exp(i\delta)$ が伝達行列

$$Q = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \tag{28}$$

によって $z' \equiv \exp(i\delta')$ に変換されるとき、位相 δ, δ' の間には

$$d\delta/d\delta' = |Az+B|^{-1} \tag{29}$$

という関係があり、これが1より大きいと今求めている解の振巾は増大し、1より小さいとそれは減少することを示した。さらに無秩序格子においては $\log(d\delta/d\delta')$ の平均値が正になり、従って解の振巾は平均して常に増大すること、またこのために固有モードが局在化するのであることを示した。 $Q^{(0)}$ は対角行列であり従ってこれに対して $d\delta/d\delta'$ は常に1であるから、今の場合 $Q^{(a_n)}$ の集りに対して $\log(d\delta/d\delta')$ の平均値が正になると考えてよいところが z が単位円の上にある限り

$$\left| \frac{Q_{11}^{(a_n)} z + Q_{12}^{(a_n)}}{Q_{21}^{(a_n)} z + Q_{22}^{(a_n)}} \right|^2 = 1 \tag{30}$$

であるから、各々の $Q^{(a_n)}$ に対して

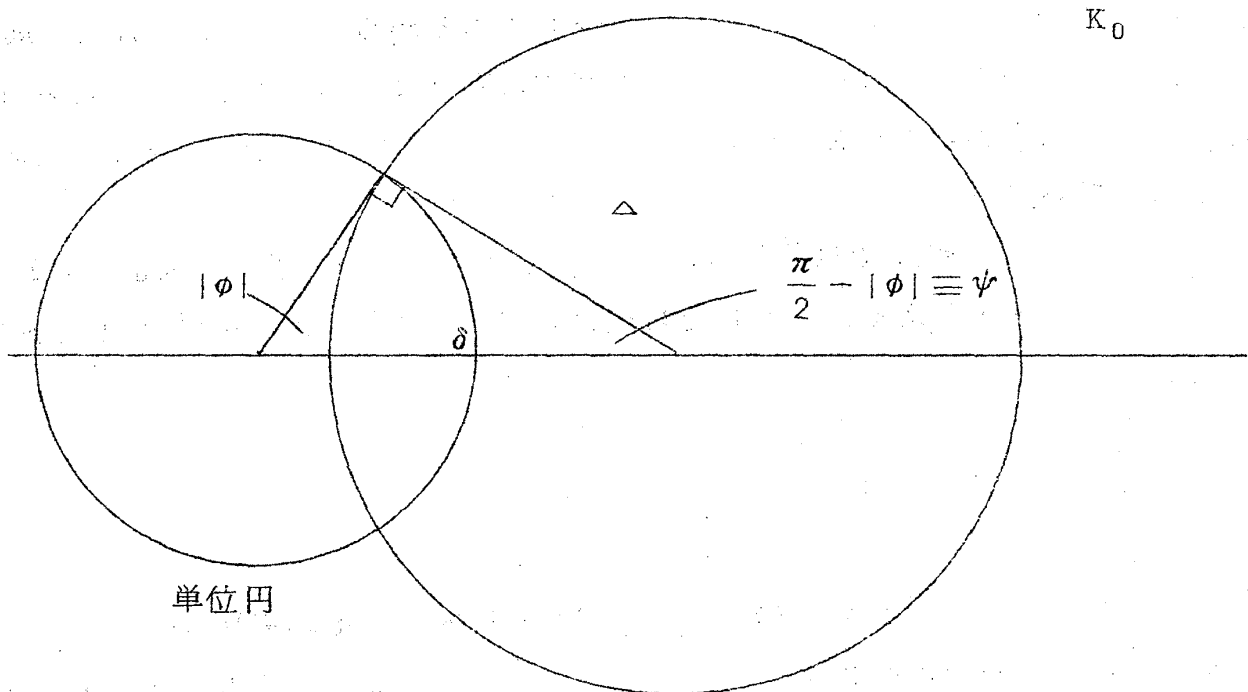
$$d\delta/d\delta' = |g_n|^{-2} \tag{31}$$

となる。従って

$$\bar{L} \equiv \langle \log(d\delta/d\delta') \rangle_{AV} = -2 \langle \log |g_n| \rangle_{AV} = 2\alpha_N(\omega, Q, c) \tag{32}$$

ところで、 $Q^{(0)}$ と Q とによる z の次々の変換は1つの確率過程であるが、この過程に対して不変な集合は単位円だけであるから、 z の定常分布は単位円の上に集中していなければならない。いいかえれば、 z がはじめ何処にあっても、時間が十分たてば必ず単位円の上に乗ってくるのである。従って長時間平均を問題にする場合には、 z は始めから、従って常に、単位円の上にあると考えてよい。こうして結局、 $\alpha_N(\omega, Q, c)$ が常に正であること、即ち無秩序部分に入射した平面波が必ず減衰することと、 Γ が常に正であること、即ち無秩序格子の固有モードが常に局在化していることとは全く同等なことになるのである。

さて、Hori⁶⁾は、特殊振動数のところでは、 $Q \geq Q_{\text{crit}}$ ならば位相 δ_n は $n \rightarrow \infty$ において $2r$ と π の間に入ってしまうことを示した。一方 Rubin は SF においては δ_n の極限分布が図の太い弧の上に入ることを示した。これは h_n が、 K_0 を単位円と考えた場合この弧の上にあることを意味する。



z が $(2r, \pi)$ の間にあるということは、 $z = ie^{ir}h$ なる関係によって h が $(-\frac{\pi}{2} + r, \frac{\pi}{2} - r)$ の間におることを意味するが、Rubinの計算とHoriの計算を対応させるためには前表によって Δ の符号を逆にしなければならないから、これは丁度Rubinの結果を与えることになる。

4. 反射率と波の減衰との関係

無秩序格子では単位円上における位相の漸近分布が $\bar{L} > 0$ になるようなものであることはまだ証明されたわけではないが、かなり確実な conjecture である。ここでは仮にこれが establish されたことがあるとして話を進めよう。すると、 $\alpha_N > 0$ ならば z の極限分布は単位円上に乗り、逆に z の極限分布が単位円上に来れば $\alpha_N > 0$ である、ということになる。無秩序格子では z の確率過程の唯一の不変集合が単位円であることから、極限分布は必ず単位円上に来、従って入射波は減衰し、固有モードは局在する、というわけである。この節では、同じことが別の観点からも結論されることを示そう。

出発点となるのは h_N と J_N の間の関係

$$1 - |h_N|^2 = J_N^2(\omega) \quad (37)$$

である。(この関係は Rubin が $\alpha_N > 0$ ならば $J_N \rightarrow 0$ 、従って $|h_N| = 1$ となり z は単位円上に来る、という推論に用いたものであるが、今度はこれを $|z| \rightarrow 1$ ならば $\alpha_N > 0$ になる、ということの論拠にしようというのである)。 $|z| \rightarrow 1$ ならば $|h| \rightarrow 1$ であるから、 $J_N \rightarrow 0$ になる。即ち入射波は消えてしまっていて、従って必然的に完全反射がおこることになる ($|h|^2$ は反射率の意味をもつ)。そこで完全反射がおこるための条件を改めて考えてみよう。

まず $r < 0$ では質量 m 、 $r \geq 0$ では質量 M の原子が規則正しく並んでいる格子を考える。 $r < 0$ では伝達行列は $Q^{(0)}$ 、 $r \geq 0$ では Q である。これを

$$Q = \begin{pmatrix} A & B \\ * & * \\ B & A \end{pmatrix} \quad (38)$$

と略記する。 $r < 0$ における入射波と反射波をそれぞれ I_0 , R_0 、 $r \geq 0$ における入射波と反射波を I , R と書こう。 $M > m$ とし、全反射が起る振動数、即ち質量 M の原子からなる規則格子の最大振動数 $\omega_{\max}(M)$ より大きい振動数を考えると、 Q の固有値 $\theta_{\pm}$ ($|\theta_{-}| > |\theta_{+}|$, $\theta_{\pm} < 0$) は実数である。従って $r \geq 0$ では $(-1)^r |\theta_{+}|^r$ に比例して減少してゆく解と、

$(-1)^r |\theta_-|^r$ に比例して増大してゆく解とが存在する。 Q が対角化される表示では、 $\omega = 2(K/M)^{1/2} \cosh \kappa$ とおくと、その対角要素は $-\exp(-2\kappa)$ $-\exp(2\kappa)$ であるから、 $-\exp(-2\kappa) = \theta_+$ 、 $-\exp(2\kappa) = \theta_-$ であり、従って I の方が減少してゆく解であり、 R の方が増大してゆく解である。
§ 2 に示したように、 $r < 0$ の領域では、 $Q^{(0)}$ という行列は $(I_0(r), R_0(r))^T$ というベクトルに作用して次のベクトル $(I_0(r+1), R_0(r+1))^T$ を作る行列である。しかし $r \geq 0$ では Q は $(I_1(r), R_1(r))^T$ に作用して $(I_1(r+1), R_1(r+1))$ を作るのではない。 Q の source state ratio と sink state ratio をそれぞれ z_+ 、 z_- とかくと、行列

$$U \equiv \begin{pmatrix} z_+ & z_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (39)$$

が Q を対角化するから、 Q は

$$Q \begin{pmatrix} I_1(r) \\ R_1(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_+ I_1(r) + z_- R_1(r) \\ I_1(r) + R_1(r) \end{pmatrix} \quad (40)$$

に作用して次の $\begin{pmatrix} z_+ I_1(r+1) + z_- R_1(r+1) \\ I_1(r+1) + R_1(r+1) \end{pmatrix}$ を作るのである。ところがエネルギー的に考えて増大する解は存在しない筈であるから、 $R_1 = 0$ とおくと、 $r \geq 0$ においては状態比は常に z_+ になければならないことになる。

z_+ は単位円の上にあるから、従って $r < 0$ においても状態比は常に単位円の上になければならない。これは $|I_0| = |R_0|$ 即ち入射波と反射波の振巾が等しく、定常波が出来ており、エネルギーの一方むきの流れがないことを意味する。即ち完全反射が起らなければならないのである。

増大する波 R_1 が存在すると、 $r \geq 0$ において r を大きくすると、状態比はいくらでも z_- に近づく、このことと上の無秩序格子の場合の $|h_N| \rightarrow 1$ ということが対応するのである。このような場合には $r \geq 0$ で減少する解と増大する解とが存在し、増大する解の方を消すように完全反射が起るのである。これに反して $\omega < \omega_{\max}(M)$ のときは I_1 も R_1 も振動解でその振巾は増大も減少もせず、従って状態比は $r = 0$ で必ずしも単位円の上になくてよく、エネルギーの流れがあってよい。この場合には完全反射は起らない

のである。このことは、 $\omega < \omega_{\max}(M)$ では Q が楕円形で、状態比が z_- のような sink point をもたないことに対応する。以上をまとめると、状態比が単位円上に近づくときには、減衰解と増大解とが存在し、増大解が消えるためには $r = 0$ で状態比が単位円上の、 $r \geq 0$ での解が減衰解になるような点になければならず、従って $|I_0| = |R_0|$ となり、全反射が起らなければならない、ということになる。

無秩序格子の場合には、 Q が楕円的であるか双曲的であるかには関係なく、状態比は単位円上に近づくから、必ず全反射が起るのであるが、これは増大する解と減少する解とが存在するので、増大する方を消すために起るのであると考えることができる。従って無秩序格子では ω の全領域にわたって固有モードの局在化が起る、ということが結論されるのである。

$r = 0$ における位相は、 $r \geq 0$ における解が減衰解になるような値に丁度ならなければならない。この値は規則格子の場合には z_+ の位相で与えられるが、無秩序格子の場合には格子の中の不純物原子の配置に依存し、一義的にはきまらない。従って入射波と反射波の位相の関係も無秩序部分の原子の配置によって変ることになる。

5. 結 論

Rubin の示した無秩序結晶内における波の減衰と、固有モードの局在化とは密接に関係した現象であり、何れも結局は状態比を格子の上で追いかけたときに、これが必ず単位円上に近づくという無秩序格子に特有の性質に基づいていることが示された。但し以上の議論はなお本質的には plausibility argument であり、より厳密な基礎づけが必要である。

文 献

- 1) R.J. Rubin, "Transmission Properties of an Isotopically Disordered One-dimensional Harmonic Crystal".

プリプリント

1次元無秩序結晶内における波の減衰と固有モードの局在化との関係

- 2) P. Dean and M.D. Bacon, Proc. Phys. Soc. 81 (1963) 642.
- 3) R. Borland, Proc. Roy. Soc. 274 (1963) 529.
- 4) J. Hori and S. Minami, Proc. Int. Conf. on Localized Excitations in Solids, 1968, Plenum Press; 物性研究 8 (1967) F67.
- 5) J. Hori, J. Phys. 1 (1968), in press.
- 6) J. Hori, Prog. Theor. Phys. Suppl. 36 (1966) 3.
- 7) Y. Fukuda, J. Phys. Soc Japan 17 (1962) 766