

不規則鎖の固有関数と熱伝導

京大・基研，京大・理* 松田博嗣，石井一成*

周期的規則格子においては一電子のエネルギー固有関数，或は調和振動子系の基準振動はいわゆる Bloch 関数型で結晶空間全体に拡っていて無限大の伝導度をもち，電子または phonon は系の周期性を乱す摂動，乃至は非調和力による摂動等を受けることにより，有限の電気伝導度，熱伝導度が得られる。

しかし一般の非周期系においてはこのような抽象には適用限界がある筈である。実際 Anderson¹⁾ は周期性よりの乱れが或程度以上大きいと静的電気伝導度は 0 になることを示唆した。Mott と Twose^{2) 3)} は一次元不規則系では常に一電子エネルギー固有関数は空間的に局在していると考えられることを述べ，Halperin⁴⁾ はこのような場合，静的電気伝導度が 0 となることを示した。振動子系においてはこれに対応してどのような事が理論的に期待出来るであろうか。以下では簡単のため一次元不規則同位元素鎖に限って論ずる。ここでは計算機実験⁵⁾⁻⁸⁾ によりかなりの情報が蓄積されているので，これと比較しつつ研究を進めることが出来る。

u_n ， m_n を第 n 番目の原子の変位と質量とすると，調和振動モデルでは運動方程式は

$$\ddot{u}_n = \mathcal{L}_n u_n \quad (1)$$

$$\mathcal{L}_n u_n \equiv \frac{\kappa}{m_n} (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - \frac{\kappa}{m_n} u_n \quad (2)$$

$$\left(-\frac{N}{2} \leq n < \frac{N}{2} \right)$$

と書かれる。基準振動においては u_n は時間 t に $u_n \propto e^{i\omega t}$ と依存し

$$-\omega^2 u_n = \mathcal{L}_n u_n \quad (3)$$

をみます。

一次元不規則ポテンシャル場での一電子波動関数の場合^{9) 10) 11)} と同様

$$L_{\pm}(\omega) = \lim_{N \rightarrow \pm\infty} \{ \ell_n |u_N| / N \} \quad (4)$$

を与えられた $\{m_n\}$ をもつ系の degree of localization と定義する。ただし u_n は (3) の解で, $L_+(\omega)$ に対して $u_0 = 0$, $u_1 = -1$ なる特解, $L_-(\omega)$ に対しては $u_0 = 0$, $u_{-1} = -1$ なる特解とする。

$\{m_n\}$ ($-\infty < n < \infty$) は一つの振動子鎖を規定するが, われわれはこのような鎖の集団を考えることが出来る。この集団は任意に与えられた鎖を集団より得る確率密度 $P(\{m_n\})$ を与えることによって規定される。この確率を重率とすることにより $L_{\pm}(\omega)$ の集団平均 $\langle L_{\pm}(\omega) \rangle$ が定義される。

以下考察する集団においては

$$P(\{m_n\}) = \prod_n p(m_n) \quad (5)$$

のように質量分布は一様で異なる原子間には相関がないとする。今, 状態比を

$$z_n \equiv u_n / u_{n-1} \quad (6)$$

で定義すると (3), (2) より $\{z_1(=\infty), z_2, z_3, \dots\}$ は仮定 (5) のために単純マルコフ鎖を作っている。単純マルコフ鎖に対する大数の法則¹²⁾より

$$\begin{aligned} L_+(\omega) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ell_n |u_N| \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=2}^N \ell_n |z_n| \end{aligned} \quad (7)$$

は確率 1 で存在し, このマルコフ過程が唯一つのエルゴード部分よりなるときは確率 1 で

$$L_+(\omega) = \langle L_+(\omega) \rangle \quad (8)$$

であることが知られている。

任意の $p(m)$ について上記エルゴード仮定が成立つかどうかはよく判っていない。特に物理的に興味のある $p(m)$ が δ 関数的特異性を持つ場合には

松田博嗣， 石井一成

問題があるようであるが、Hori, Minami の計算機実験¹¹⁾では(8)は大
体成立しているようである。

エルゴード仮定が成立して Z_n が $n \rightarrow \infty$ で極限分布をもつとすると $\omega \rightarrow 0$
の極限で Z_n の極限分布のみたす積分方程式を解くことにより

$$\langle L_+(\omega) \rangle = \alpha \omega^2 + o(\omega^2) \quad (9)$$

$$\alpha = \frac{\langle (\Delta m)^2 \rangle}{8K \{ \langle m \rangle - \kappa / \omega^2 \}} \quad (10)$$

が導かれる。ただし

$$\langle m \rangle = \int m p(m) dm \quad (11)$$

$$\langle (\Delta m)^2 \rangle = \int (m - \langle m \rangle)^2 p(m) dm \quad (12)$$

である。

¹³⁾
最近 Rubin は有限個 N 個の同位元素を含む他は等しい質量の原子よりなる無限鎖に
おいて他方より平面波が入射したとき、同位元素の存在する部分を透過する波の透過係数
を求めた。透過波の振巾と入射波の振巾の比を $\exp[-N \alpha_N(\omega)]$ とするとき、彼は
大部分の ω について $\lim_{N \rightarrow \infty} \alpha_N(\omega) > 0$ なることを示したが、Hori はこの¹⁴⁾
量と $L_+(\omega)$ との関係調べ、 $\lim_{N \rightarrow \infty} \alpha_N(\omega) > 0$ ならば $L_+(\omega) > 0$ と
なることを示した。

これよりわれわれの不規則鎖の集団においては任意の ω に対し確率 1 で
 $L_+(\omega) > 0$ と仮定してもよかろう。これは固有関数の局在性とどのような
関連性をもつか、Titchmarsh¹⁵⁾によって確立された二階常微分方程式の固有
関数による展開定理は Asahi¹⁶⁾によって(3)の型の差分方程式の場合に拡張
して用い得ることが示されたが、この展開定理に関連して定義される系のス
ペクトルは上の仮定の下で連続スペクトルを持ち得るかどうか。連続スペク
トルを持たぬとすると展開の base となる(3)をみたす固有関数はすべて
局在していることが導かれる。研究会においては連続スペクトルを確率 1 で
持ち得ないと述べたが、その後証明に穴があることに気付いた。従ってたと

え $L_+(\omega) > 0$ が事実であっても固有関数の局在性との結びつきはまだ明らかではない。

しかし $L_+(\omega) > 0$ なるとき (3) の有界な解は

$$\lim_{n \rightarrow \pm\infty} \left\{ |u_n| / e^{-L_+(\omega)|n|} \right\} = 0 \quad (13)$$

であることは容易に証明される。このことから十分大きい有限な系で、固有関数が空間的に order $2/L_+(\omega)$ なる巾をもって局在することが導かれると云う証明はないが、 $N=16, 50, 200$ (5) (6) (7) について計算機で求められた固有関数との比較はこの予想を支持している。

この予想に基づいて以下次元不規則系の熱伝導を考える。Payton, Visscher, Rich (8) は両端がそれぞれ温度 T_1, T_N ($T_1 - T_N = \Delta T > 0$) なる熱浴と接触した長さ N の不規則振動子系の熱伝導率を計算機実験で求めた。このモデルの運動方程式は

$$\left. \begin{aligned} m_1 \ddot{u}_1 &= K(u_2 - u_1) - K u_1 - \kappa u_1 - \lambda m_1 \dot{u}_1 + f_1(t) \\ m_n \ddot{u}_n &= K(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - \kappa u_n \\ m_N \ddot{u}_N &= K(u_{N-1} - u_N) - K u_N - \kappa u_N - \lambda m_N \dot{u}_N + f_N(t) \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

で代表される。熱浴との接触は摩擦係数 λ と不規則力 $f_j(t)$ ($j=1, N$) で表わされ

$$\overline{f_j(t) f_{j'}(t')} = 2 k_B T_j \lambda \delta_{jj'} \delta(t-t') \quad (15)$$

である。ただし k_B は Boltzmann 定数で、 $\overline{\quad}$ は不規則力についての集団平均を示す。

このとき $\lambda \rightarrow 0$ の極限で

$$\overline{\dot{u}_n(t)^2} = \frac{k_B}{m_n} \sum_{\nu} \left(\frac{T_1 x_{\nu 1}^2 + T_N x_{\nu N}^2}{x_{\nu 1}^2 + x_{\nu N}^2} \right) x_{\nu, n}^2 \quad (16)$$

が導かれる。

松田博嗣, 石井一成

ただし $x_{\nu n} / \sqrt{m_n}$ は第 ν 番目の基準振動における第 n 番目の原子の変位で

$$\sum_n x_{\nu, n} x_{\nu', n} = \delta_{\nu\nu'}, \quad \sum_\nu x_{\nu, n} x_{\nu', n} = \delta_{nn'} \quad (17)$$

と規格直交化されている。

一方熱浴より単位時間に系に流入する熱量は

$$Q = m_1 \lambda \left\{ \frac{k_B T_1}{m_1} - \overline{\dot{u}_1^2} \right\} \quad (18)$$

で与えられる。

もし $m_n = M$ ($n = 1, 2, \dots, N$) ならば対称性より

$$x_{\nu 1}^2 = x_{\nu N}^2$$

となり

$$M \overline{\dot{u}_n^2} = \frac{k_B}{2} (T_1 + T_N) \quad (19)$$

従って (18) より

$$Q = \frac{\lambda}{2} k_B \Delta T \quad (20)$$

となり熱流は両端の温度差に比例する。

不規則な質量分布をもつときは (13) に関連して述べた予想と (8), (9) により

$$x_{\nu n}^2 = \frac{1}{2} \alpha \omega_\nu^2 \exp \{ -\alpha \omega_\nu^2 |n - n_\nu| \} g_\nu(n) \quad (21)$$

$$g_\nu(n) = O(1)$$

と仮定する。ただし ω_ν は ν 番目の基準角振動数, n_ν はその固有関数の絶対値のピークの座標で n_ν は不規則に分布していると仮定する。

この結果 $N \gg 1$ として

(i) $\kappa = 0$ のときは

$$Q \simeq k_B c_1 \lambda \frac{\langle m \rangle}{\sqrt{\langle (\Delta m)^2 \rangle}} \frac{\Delta T}{\sqrt{N}} \quad (22)$$

ただし, c_1 は $O(1)$ の定数

(ii) $\kappa > 0$ のときは

$$Q \simeq \frac{k_B \lambda}{4 \sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\langle (\Delta m)^2 \rangle}}{\langle m \rangle} \frac{\kappa}{K} \exp \left[- \frac{\kappa \langle (\Delta m)^2 \rangle}{8K \langle m \rangle^2} N \right] \sqrt{N} \Delta T \quad (23)$$

となる。

(i) の場合熱流は $\Delta T / \sqrt{N}$ に比例し熱伝導率は $N \rightarrow \infty$ で $O(\sqrt{N})$ で発散する。このことは全部で N 個の基準振動の中 $O(\sqrt{N})$ は空間的に局在していない wave-like mode となり、そのような mode のみが熱伝導率に寄与し、しかもその mode による熱流が規則鎖と同様 ΔT に比例していると考えてよいことに対応していると解釈される。Q の $(\Delta T / \sqrt{N})$ - 依存性についての計算機実験の解析はないが、与えられた N での熱伝導率の不純物濃度依存性の計算機実験⁸⁾の結果は (22) を支持している。

(ii) の場合は $N \rightarrow \infty$ で $\omega \rightarrow 0$ となる mode はないので、すべての mode は空間的に局在し、ために熱伝導率は 0 に tend すると考えられる。

非調和力が存在する場合(i)について計算機実験では熱伝導率は反って増加しており、これは局在した基準振動の間に coupling が生じたためと考えられる。⁸⁾非調和力が存在する場合の熱伝導率を評価するために、仮定として(I) $O(\sqrt{N})$ 個の wave-like mode は非調和力のため有限の熱伝導率しか持たなくなり、 $N \rightarrow \infty$ ではそれよりの寄与は無視される。かくて(II)本質的にすべての mode は非摂動系では局在しており、非調和力によって局在した mode 間に phonon の hopping が起る。この際各 hopping 間の memory effect は無視されたとする。この仮定の下に非調和力による摂動ポテンシャルをこの

$$V = A \sum_n (u_{n+1} - u_n)^3 \quad (24)$$

と取って計算すると $T \rightarrow 0$ の極限で

$$Q \propto A^2 \frac{\langle m \rangle^{7/2}}{\langle (\Delta m)^2 \rangle^2} T \frac{\partial T}{\partial n} \quad (25)$$

となる。ただし $\frac{\partial T}{\partial n}$ は温度勾配である。 $T \rightarrow 0$ での計算機実験の報告がない

松田博嗣, 石井一成

ので直接 (25) との比較は出来ないが, 熱伝導率の温度依存性, 不純物濃度依存性共に現在の計算機実験の結果は質的に一致していない。これは実験の N がまだ十分大きくなくて仮定 (I) がかなり悪いのかも知れない。

結論として計算機実験との比較より一次元不規則調和振動子系の固有関数, 熱伝導は degree of localization なる量によって大体よく特徴づけられ解釈されるようである。ただしその正当性の理論づけはまだ十分とは云い難い。一次元不規則非調和振動子系の熱伝導はまだ計算機実験の解釈も十分でないのが現状のようである。

文 献

- 1) P. W. Anderson, Phys. Rev. 109 (1958), 1492
- 2) N. F. Mott and W. D. Twose, Adv. in Phys. 10 (1961), 107
- 3) N. F. Mott, Adv. in Phys. 16 (1967), 50
- 4) B. I. Halperin, Adv. Chem. Phys. 13 (1967), 123
- 5) H. B. Rosenstock and R. E. McGill, J. Math. Phys. 3 (1962), 200
- 6) P. Dean and M. D. Bacon, Proc. Phys. Soc. 81 (1963), 642
- 7) D. N. Payton, II and W. M. Visscher, Phys. Rev. 156 (1967), 1032
- 8) D. N. Payton, II, M. Rich and W. M. Visscher, Phys. Rev. 160 (1967), 706
- 9) R. E. Borland, Proc. Roy. Soc. A 274 (1963), 529
- 10) R. E. Borland and N. F. Bird, Proc. Phys. Soc. 83 (1964), 23
- 11) J. Hori and S. Minami, "Proc. Int. Conf. on Localized Excitations in Solids", (Plenum Press, 1968), p. 611

- 12) Doob, "Stochastic Processes" (John Wiley Sons, New York, 1953), p.218
- 13) Rubin, Preprint
- 14) J.Hori, 物研 10 (1963), No.2, p.93
- 15) E.C.Titchmarsh, "Eigenfunction Expansions" (Oxford, 1962) Part 1
- 16) T.Asahi, Suppl. Prog. Theor. Phys. No.36 (1966), 55
- 17) H.Nakazawa, Prog. Theor. Phys. 39 (1968), 236.