Title	1次元液体格子内における固有モードの局在性及び入射波の減衰
Author(s)	広田, 徹
Citation	物性研究 (1971), 16(4): 487-499
Issue Date	1971-07-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/88298
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

1次元液体格子内における固有モードの局在性及び入射波の減衰

芝浦工大・教養物理　広　田　　徹

（６月２１日受理）

§ 序

１９５８年Anderson[1]は３次元の random 格子系のスピン Diffusion を取扱い site エネルギーの分布の幅がスピン間の相互作用に比べ大きい時にはスピンは Diffusion しない事即ち１種の局在状態が存在することを示した。又 Mott[2] & Twose 及其他は１次元の電子系で Potential が random であればすべての固有モードが局在している事を推論した。Borland[3]は１９６３年１次元の random Potential 内の電子系を取扱い，格子点での波動函数の振幅比の対数を考えこの ensemble 平均 L が正であれば局在モードが存在する事を示し，高エネルギーの時の L を δ 函数 Potential 場に対し求めその正符号を確かめている。又，松田，石井[4]は Furstenberg[5]の理論より random 系に対しては L（指数因子）が常に正であることを導き，振動子系について低振動数の場合を取扱っている。広田，石井[6]は１次元の δ 函数 Potential 場内の電子系に対し，その強度が Lorentz 分布をする時の厳密解より L の解析形を求めその正符号を確認している。又エネルギー依存性を得ている。Lloyd[7]は１昨年 Anderson と同様なモデル（電子系）を取扱い site エネルギーが Lorentz 分布をするときの ensemble averaged Green 函数の厳密解から局在状態の nonexistence を主張している。一方 Halperin，Mott[8]は固有解が完全に局在するならば０°K で static conductivity が０になる事を示している。

即ち Localization に関する議論は大別して２つに分けられる。

〔１〕　time independent な取扱い（１次元に限られる）

広田　徹

Borland の指数因子　L＞0

このLを局在の幅と結びつける事及びLのエネルギー或いは振動数依存性が問題となる。

〔Ⅱ〕　time－dependentな取扱い

この場合はDiffusionがない事を示しこれを局在性と結びつけているがこれは同一のものではないかもしれない。即ちtime dependent な取扱いをするとき，t＝0　で固有解から出発すれば問題はないが，δ函数から始めている点に疑問はあるように思われる。

この報告ではRandom　変数の変化の幅が小さい場合（こゝではこれを広義の液体格子と呼ぶことにする。）を取扱う。1次元の電子系，振動子系の両方についてphase 分布函数を求めることにより指数因子Lの正符号を確め，そのエネルギー依存性を解析的に求める。又最後にLが正のとき，液体格子に入射した波が完全に減衰し，侵入度がLに逆比例することを明らかにする。

§　分布函数とLocalization 因子L

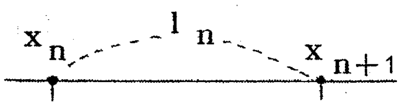
〔モデル〕

〔Ⅰ〕　1次元δ函数ポテンシャル場内の1電子状態（この場合δ函数ポテンシャル中心間の距離（spacing），或いはδ函数ポテンシャルの強度がRondom　変数となる。）

〔Ⅱ〕　1次元調和振動子模型（原子の質量M或いはCoupling constant Kが Random　変数となる。）

〔Ⅰ〕　ポテンシャル中心x_nとx_{n+1}の間の波動函数を

$$\psi(x)=A_n\cos\{k(x-x_n)+\varphi_n\} \qquad x_n<x<x_{n+1} \tag{1}$$



$$v(x) = \Sigma V_n \delta(x - x_n) \tag{2}$$

とおくと $x = x_{n+1}$ に於ける接続条件より φ_n と φ_{n+1} の間の関係として

$$\tan \varphi_{n+1} = -v_n + \tan(\varphi_n + \lambda_n) \tag{3}$$

を得る。ただし $\lambda_n = k\, l_n$, $v_n = \dfrac{V_n}{k}$ (4)

ここで2つの場合に分けて議論する。

I) v : 変化, λ : 1定

(3) で $z = \tan \varphi$ とおくと

$$z_{n+1} = -v_n + \frac{z_n + \tan \lambda}{1 - z_n \tan \lambda} \tag{5}$$

となるが

$$y = -z \sin \lambda + \cos \lambda \tag{6}$$

と置換えると(5)は

$$y_{n+1} = \alpha_n - \frac{1}{y_n} \tag{7}$$

$$\alpha_n = 2\left(\cos \lambda + \frac{v_n}{2} \sin \lambda\right) \tag{8}$$

と変形出来る。

y に対する分布函数を $w(y)$ とすると

$$w(y) = \int w\left(\alpha - \frac{1}{y}\right) \frac{1}{y^2} f(\alpha)\, d\alpha \tag{9}$$

の式が得られる。($f(\alpha)$は α の分布函数) これは Schmidt の積分方程式と呼ばれる。さて Random 変数 v が平均値 $\overline{v} = v_0$ から僅かな分散を持つ場合の解を求めよう。$w(y)$ の代りに積分量 $W(y)$ を 考える。

$$W(y)=\int_{y}^{\infty} w(y)\,dy \tag{10}$$

を考える。すると

$$W(y)=\int W\left(\alpha-\frac{1}{y}\right) f(\alpha)\,d\alpha+W(0) \tag{11}$$

となる。こゝで被積分項内の$W\left(\alpha-\frac{1}{y}\right)$で$\alpha$が argument として linear に含まれていることに着目して$W\left(\alpha-\frac{1}{y}\right)$を$\alpha_0-\frac{1}{y}$の辺り（$\alpha_0$は$\alpha$の平均値）で展開する。

$$W\left(\alpha-\frac{1}{y}\right)=W\left(\alpha\quad-\frac{1}{y}\right)+(\alpha-\alpha_0)\frac{dW}{dy'}\Bigg|_{y'=\alpha_0-\frac{1}{y}}$$

$$+\frac{(\alpha-\alpha_0)^2}{2}\frac{d^2W}{dy'^2}\Bigg|_{y'=\alpha_0-\frac{1}{y}}+\cdots\cdot \tag{12}$$

これを（11）に入れ，αで積分し$\overline{(\alpha-\alpha_0)^s}$の2次迄を残すならば

$$W(y)=W\left(\alpha_0-\frac{1}{y}\right)+\frac{\sigma^2}{2}\frac{d^2W}{dy'^2}\Bigg|_{y'=\alpha_0-\frac{1}{y}}+W(0) \tag{13}$$

を得る。y'で上式を表わし，改めて$y'\to y$と置き直すと

$$W\left(\frac{1}{\alpha_0-y}\right)=W(y)+\frac{\sigma^2}{2}\frac{d^2W}{dy^2}+W(\infty) \tag{14}$$

となり，1つの函数微分方程式となる。この解はσ^2が$v_0{}^2$に比べ充分小さい時

$$W(y)=W_0(y)+\frac{\sigma^2}{2}W_1(y) \tag{15}$$

の形に求めることが出来る。$W_0(y)$は$\alpha=\mathrm{const}=\alpha_0$の時の解で

$$W_0(y)=\frac{1}{\pi}\left\{\tan^{-1}\frac{y-\frac{\alpha_0}{2}}{\sqrt{1-\frac{\alpha_0{}^2}{4}}}+\frac{\pi}{2}\right\} \qquad (16)$$

又W_1 (y)は

$$W_1(y)=\frac{G(y)}{(y^2-\alpha_0 y+1)^2} \qquad (17)$$

とおくとG (y)はyの2次式であり，$G(y)=ay^2+by+c$ としてa，b，c，を決めればよい。(16)(17)を(14)に入れ，左右の$\overline{(\alpha-\alpha_0)}^s$の0次の項及び2次の項を夫々等しく置くことにより，0次の項は自動的に満されていることがわかる。2次の項よりa，b，cに対する条件式が得られ

$$a=\frac{\sqrt{1-\frac{\alpha_0{}^2}{4}}}{\pi\alpha_0}, \qquad b=c=0 \qquad (18)$$

となる。この解は規則系($\alpha=\alpha$)のgap 内及びband edgeの近傍のエネルギー値を持つ状態を併けば有効である。指数因子Lは

$$L=\left\langle \ell n\left|\frac{A_{n+1}}{A_n}\right|^2\right\rangle=\left\langle \ell n\left\{\frac{1+z_{n+1}^2}{1+z_n^2}(z\sin\lambda-\cos\lambda)^2\right\}\right\rangle$$

$$=\langle \ell n(z_n\sin\lambda-\cos\lambda)^2\rangle$$

$$=\langle \ell n\, y_n{}^2\rangle=\int_{\infty}^{-\infty} w(y)\,\ell n\, y^2 dy$$

$$=-\int_{-\infty}^{\infty} w(y)\,\ell n\, y^2 dy \qquad (19)$$

により計算出来る。上式の負符号は$dy=-\sin\lambda\, dz$より生じているものである。引続き

$$L=-\left[W(y)\,\ell n\, y^2\right]_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2}{y}W(y)dy$$

$$=\frac{\sigma^2\sqrt{1-\frac{\alpha_0^2}{4}}}{\pi\alpha_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{y\,d\,y}{(y^2-\alpha_0 y+1)^2}=\frac{\sigma^2}{2}$$

$$=\frac{\sin^2\lambda_0}{2}(\overline{v^2}-\overline{v}\ \ \overline{v})=\frac{\sin^2\lambda_0}{2k^2}(\overline{V^2}-\overline{V}\,\overline{V})$$

となり，ポテンシャル強度Vの分散に比例し波数の自乗に逆比例する。又，$\lambda=\pi$に近付くと減少する。又積分状態密度N（E）はφの分布をP（φ）とするとき

$$N(E)=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}-\lambda}P(\varphi)\,d\varphi=\int_0^{\infty}w(y)\,d\,y=w(0) \qquad (21)$$

$$0<\lambda<\pi$$

より求められ

$$=W(0)=W_0(0)+\frac{\sigma^2}{2}W_1(0)=W_0(0) \qquad (22)$$

となる。

次に

Ⅱ）　λ：変化，　v：一定

φの分布函数P（φ）に 対する方程式は

$$P(\varphi)=\int P(-\lambda+\tan^{-1}(v+\tan\varphi))\frac{\sec^2\varphi}{1+(v+\tan\varphi)^2}k(\lambda)\,d\lambda \qquad (23)$$

h（λ） はλの分布函数である。上式の被積分項内のP（$-\lambda+\tan^{-1}(v+\tan\varphi)$）の argumentに$\lambda$がlinearで含まれている点に着目してⅠ）の場合の様に，λの平均値λ_0の廻りでPを展開する。

$$P(-\lambda+\tan^{-1}(v+\tan\varphi))=P(-\lambda_0+\tan^{-1}(v+\tan\varphi))$$

$$+(\lambda_0-\lambda)\frac{dW}{d\varphi'}\Big|_{\varphi'=-\lambda_0+\tan^{-1}(v+\tan\varphi)}$$

$$+\frac{1}{2}(\lambda_0-\lambda)^2\frac{d^2W}{d\varphi'^2}\Big|_{\varphi'=-\lambda_0+\tan^{-1}(v+\tan\varphi)}$$

$$+\cdots\cdots \tag{24}$$

これを(23)に入れ積分し，変数をφ'で表わすと

$$\frac{\sec^2(\varphi'+\lambda_0)}{1+[-v+\tan(\varphi'+\lambda_0)]^2}P(\tan^{-1}\{-v+\tan(\varphi'+\lambda_0)\})$$

$$=P(\varphi')+\frac{\varepsilon^2}{2}\frac{d^2P}{d\varphi'^2},\qquad \varepsilon^2=\overline{(\lambda-\lambda_0)^2} \tag{25}$$

ここで　$P(\varphi')=U(z)(1+z^2),\qquad z=\tan\varphi'$

$$\tag{26}$$

によりU(z)を定義すると

$$\frac{1+\beta^2}{(1-\beta z)}V\left(-v+\frac{\beta+z}{1-\beta z}\right)=U(z)+$$

$$\frac{\varepsilon^2}{2}\frac{d}{dz}\left[(1+z^2)\frac{d}{dz}(1+z^2)U(z)\right]$$

$$\beta=\tan\lambda_0 \tag{27}$$

となり，この函数微分方程式の解はλの分散ε^2が$\lambda_0{}^2$に比べ充分小さいとき

$$U(z)=V_0(z)+\frac{\varepsilon^2}{2}V_1(z) \tag{28}$$

$$V_0(z)=\frac{\sqrt{1-\frac{v^2}{4}-\frac{v}{\beta}}}{\pi}\frac{1}{z^2+vz+1-\frac{v}{\beta}} \tag{29}$$

$$V_1(Z)=\frac{\sqrt{1-\frac{v^2}{4}-\frac{v}{\beta}}}{\pi}\quad\frac{F(z)}{\left[z^2+vz+1-\frac{v}{\beta}\right]^2} \tag{30}$$

の形に求めることが出来る。F(z) は z の4次式であり未定の定数を5つ持つ。この解を(27)に入れ，左右の0次と2次の項($\lambda-\lambda_0$ につき)を夫々等しく置くことによりF(z) を決めることが出来る。こゝでは式が複雑になるので　$v\to 0$ の場合を考えよう。この時は

$$\frac{d}{dz}\left[(1+z^2)\frac{d}{dz}(1+z^2)V_0(z)\right]\to$$

$$v\;\frac{\frac{2}{\beta}z^2+4z-\frac{2}{\beta}}{(1+z^2)^2}+O(v^2) \tag{31}$$

$$V(z)\longrightarrow\frac{az^2+bz+c}{\left[1+z^2\right]^2} \tag{32}$$

として3つの係数a，b，cを決めるだけでよい(31)，(32)を(27)に入れると

$$a=c=o,\;b=-\frac{2v}{\beta^2}(1+\beta^2)=-\frac{2v}{\sin^2\lambda_0} \tag{33}$$

が得られF(z) 従ってU(z)が 決まる。

この解を使用してLocalization L を計算する。

$$L=\langle \ell n\left|\frac{A_{n+1}}{A_n}\right|^2\rangle=\langle \ell\;\frac{1+z_{n+1}^2}{1+(z_{n+1}+v)^2}\rangle$$

$$=-\langle \ell n\left(1+\frac{2vz_{n+1}+v^2}{1+z_{n+1}^2}\right)\rangle$$

$$=-v\langle\frac{2z}{1+z^2}\rangle+O(v^2)$$

$$=\frac{2\epsilon^2 v^2}{\pi \sin^2\lambda_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{z^2}{(1+z^2)^2}dz=\frac{\epsilon^2 v^2}{\sin^2\lambda_0}=\frac{\epsilon^2 V^2}{k^2\sin^2\lambda_0} \tag{34}$$

となりvが1に比べ充分小さい時λの分散及びv^2に比例し常に正値である。興味があるのはⅠ）の場合と異なり，$\sin^2\lambda_0$が分母に入っている点である。Makinson & Roberts[9]が指摘したようにbandのedge附近でLocalizationが大きくなるのを示しているように思う。

〔Ⅱ〕　調和振動子モデル

n番目の原子の変位をx_nとすると

$$-M_n\omega^2 x_n=K_n(x_{n+1}+x_{n-1}-2x_n) \tag{35}$$

$z_{n+1}=\dfrac{x_{n+1}}{x_n}$　とおくと

$$z_{n+1}=\alpha_n-\frac{1}{z_n} \quad (36) \qquad \alpha_n=2-\frac{M_n}{K_n}\omega^2 \quad (37)$$

の関係が得られ，Zの分布函数を$\varphi(z)$とすると

$$\varphi(z)=\int\varphi\left(\alpha-\frac{1}{z}\right)\frac{1}{z^2}R(\alpha)d\alpha$$

となり，δ函数ポテンシャルの強度が変化する場合と同一の式となる。Localization Lも同様に

$$L=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(z)\ln z^2dz=\frac{\sigma^2}{2}=\frac{\overline{M^2}-\overline{M}\,\overline{M}}{2K^2}\omega^4>0$$

となる。（たゞし原子の質量Mが変化するとする）

§　入射波の減衰

1次元のRandom　格子に波が入射するときの減衰を考える。この問題はRubin[10]　により取扱われた。彼は入射波のtransmissionをinitial value problemとして研究しt→∞の時の漸近的な振舞より数値計算の助けも借りて，多くのエネルギー値に対し，指数的に減衰する事を示した。又，南，堀[11]はPhase theoryによりこの問題を議論している。こゝではRandom格子内の減衰の問題を指数因子Lの正値性を使って論ずる。

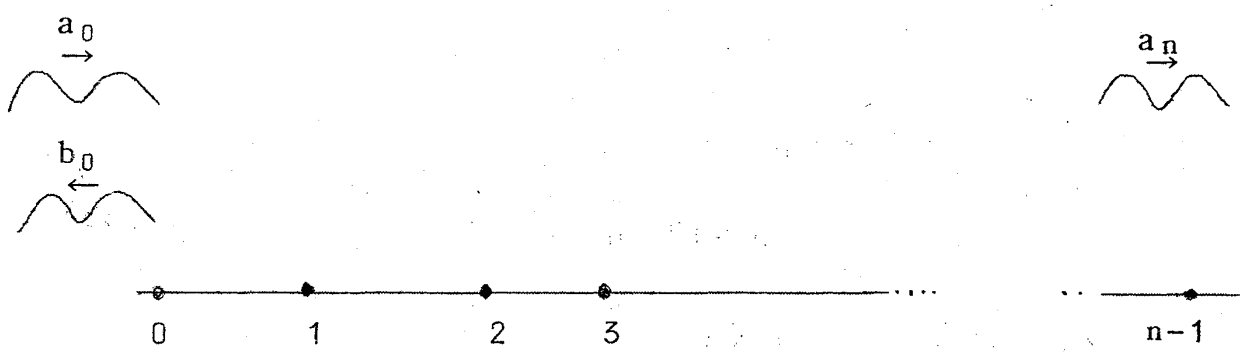


Fig.　1.

図のように入射波が左から0番目の格子点に入り，n−1番目の格子点から出るとしよう。i番目の格子点とi+1番目の格子点との間における進行波の振幅をa_i，後退波の振幅をb_iとすると

$$
\begin{aligned}
a_{i+1} &= T_{11}^{(i)} a_i + T_{12}^{(i)} b_i \\
b_{i+1} &= T_{21}^{(i)} a_i + T_{22}^{(i)} b_i
\end{aligned}
\tag{40}
$$

の関係がある。(T) は transfermatrix で unimodular 性を持つ。即ち

$$
T_{11} T_{22} - T_{12} T_{21} = 1, \quad T_{11} = T_{22}^{*}, \quad T_{12} = T_{21}^{*} \tag{41}
$$

(40) の繰返しにより

$$a_n = M_{11}a_0 + M_{12}b_0$$
$$b_n = M_{21}a_0 + M_{22}b_0 \tag{42}$$

が得られるが上のmatrix M も又 unimodular 性を持つ

$$M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 1$$
$$M_{11} = M_{22}^{*},\ M_{12} = M_{21}^{*} \tag{43}$$

問題の条件は右方から入射波が来ないのであるから

$$\lim_{n\to\infty} b_n = 0 \tag{44}$$

である。従って $n \to \infty$ の場合に対して(42)を解くと

$$\frac{|a_n|^2}{|a_0|^2} = \frac{1}{|M_{22}|^2} \tag{45}$$

が得られる。matrix M は n 個の matrix の積

$$M = T^{(n-1)} \cdot T^{(n-2)} \cdot \cdot T^{(1)} \cdot T^{(0)}.$$

である。指数因子Lが正の時 $n \to \infty$ に従い，実数解の振幅の ensemble 平均は無限に大きくなる。従って任意の初期条件から出発した複素解の振幅の ensemble 平均も又無限に大きくなるのは当然である。故に Matrix M の各成分の絶対値(ensemble 平均) も無限に増大する。従って(45)より $|a_n|^2 \to 0$ となり入射波は完全に減衰することになる。減衰の幅即ち侵入距離は勿論Lに逆比例する。

§ 結 論

まとめとして言えることは電子系では δ 函数ポテンシャルの強度が変化する場合でも Localization Factor L は液体格子に対し常に正符号を示すということである。このことは松田，石井による一般論を裏書する。次に興味のあ

ることは，LがRandom　変数の分散に比例し，波数の自乗に逆比例する点である。これはδ函数ポテンシャルの強度が変化する場合でもspacing　が変化する場合でも共通である。最後に両者の場合の違いである。$\lambda=\pi$に近づくにつれ，強度変化の時のLは0に近づく。広田，石井[5]はLorentz　分布の時の厳密解から$\lambda=\pi$の時$L=0$になることを示したが今の結果はこれに対応していると思われる。しかしspacing　変化の時のLは逆に増大しLocalizeしやすくなる。この事はMakinson & Roberts[9]の指摘した傾向を裏書している。もっともこの取扱いは規則系のband　edge　近傍では有効とは言えないのではっきりした結果ではないが，そのような傾向は(20)と(34)の違いから理解できる。又調和振動子系でもLは振動数の大小に拘らず常に正値であり，質量の分散に比例する。次の報告で出来ればband　edge　附近及びgap内のエネルギー値に対するLocalization　を調べたい。

参　考　文　献

1)　Anderson, P.W. 1958 Phys.Rev. 109 1492

2)　Mott, N.F. & Twose, W.D. 1961 Adv. Phys. 10 107
Gubanov, A. J. 1963 Quantum Electron Theory of Amorphous Conductors (New York)

3)　Borland, R.E. 1963 Proc.Roy. Soc. A 274 529

4)　Matsuda, H. & Ishii, K. 1970 Suppl. Prog. Theor. Phys. №. 45, 56

5)　Furstenberg, H 1963 Trans. Amer. Math. Soc. 108 3

6)　Hirota, T & Ishii, K 1971 Prog. Theor. Phys. 45 1713

7)　Lloyd, P 1969 J. Phys. c 2 1717

8)　Halperin. B. I. 1967 Adv. in Chem. Phys. 13
Mott, N.F. 1967 Adv. Phys. 16 49 : 1970 Phil. Mag. 22 9

9)　Makinson, R & Roberts, A 1962 Proc. Phys. Soc. 79 222

10) Rubin, R. J. 1968 J. Math. Phys. 9 2252
Minami, S. & Hori, J 1970 Suppl. Prog. Theor. Phys. №. 45, 87