

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 2 1 日 受 理)

§ 序

1958年Anderson¹⁾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Mott²⁾ & 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。Borland³⁾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Furstenberg⁵⁾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。Lloyd⁷⁾ 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, Mott⁸⁾ 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)

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 が無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 関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 の正符号を確かめ, 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〕

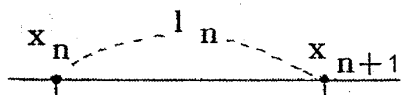
〔Ⅰ〕 1次元 δ 関数ポテンシャル場内の 1電子状態 (この場合 δ 関数ポテンシャル中心間の距離 (spacing), 或いは δ 関数ポテンシャルの強度が Random 変数となる。)

〔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

$$\psi(x) = A_n \exp \{ k(x - x_n) + \varphi_n \} \quad x_n < x < x_{n+1}$$

(1)



$$v(x) = \sum V_n \delta(x - x_n) \quad (2)$$

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

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

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

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

となるが

$$y = -z \sin \lambda + \cos \lambda \quad (6)$$

と置換えると(5)は

$$y_{n+1} = \alpha_n - \frac{1}{y_n} \quad (7)$$

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

と変形出来る。

y に対する分布函数を $w(y)$ とすると

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

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 $\bar{v} = v_0$ 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。

$$W(y) = \int_y^{\infty} w(y) dy \quad (10)$$

を考える。すると

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

となる。こゝで被積分項内の $W\left(\alpha - \frac{1}{y}\right)$ で α 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 (α_0 は α の平均値) で展開する。

$$\begin{aligned} W\left(\alpha - \frac{1}{y}\right) = & W\left(\alpha_0 - \frac{1}{y}\right) + (\alpha - \alpha_0) \frac{dW}{dy'} \Big|_{y' = \alpha_0 - \frac{1}{y}} \\ & + \frac{(\alpha - \alpha_0)^2}{2} \frac{d^2W}{dy'^2} \Big|_{y' = \alpha_0 - \frac{1}{y}} + \dots \end{aligned} \quad (12)$$

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

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

を得る。 y' で上式を表わし、改めて $y' \rightarrow y$ と置き直すと

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

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

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

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

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

又 $W_1(y)$ は

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

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 $(\alpha - \alpha_0)^s$ 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

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

となる。この解は規則系 ($\alpha = \alpha_0$) 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れば有効である。指数因子 L は

$$\begin{aligned} L &= \langle \ell_n \left| \frac{A_{n+1}}{A_n} \right|^2 \rangle = \langle \ell_n \left\{ \frac{1 + z_{n+1}^2}{1 + z_n^2} (z_n \sin \lambda - \cos \lambda)^2 \right\} \rangle \\ &= \langle \ell_n (z_n \sin \lambda - \cos \lambda)^2 \rangle \\ &= \langle \ell_n y_n^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w(y) \ell_n y^2 dy \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} w(y) \ell_n y^2 dy \end{aligned} \quad (19)$$

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

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

広田 徹

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

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

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 $P(\varphi)$ とするとき

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

$$0 < \lambda < \pi$$

より求められ

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

となる。

次に

Ⅱ) λ : 変化, v : 一定

φ の分布函数 $P(\varphi)$ に 対する方程式は

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

$h(\lambda)$ 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 λ 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。

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

$$\begin{aligned}
 (10\epsilon) & + (\lambda_0 - \lambda) \frac{dW}{d\varphi'} \Big|_{\varphi' = -\lambda_0 + \tan^{-1}(v + \tan \varphi)} \\
 & + \frac{1}{2} (\lambda_0 - \lambda)^2 \frac{d^2 W}{d\varphi'^2} \Big|_{\varphi' = -\lambda_0 + \tan^{-1}(v + \tan \varphi)} \\
 & + \dots
 \end{aligned} \tag{24}$$

これを(23) に入れ積分し、変数を φ' で表わすと

$$\begin{aligned}
 & \frac{\sec^2(\varphi' + \lambda_0)}{1 + [-v + \tan(\varphi' + \lambda_0)]^2} P(\tan^{-1}\{-v + \tan(\varphi' + \lambda_0)\}) \\
 & = P(\varphi') + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{d^2 P}{d\varphi'^2}, \quad \epsilon^2 = (\lambda - \lambda_0)^2
 \end{aligned} \tag{25}$$

$$\text{ここで } P(\varphi') = U(z)(1 + z^2), \quad z = \tan \varphi' \tag{26}$$

により $U(z)$ を定義すると

$$\begin{aligned}
 & \frac{1 + \beta^2}{(1 - \beta z)} V(-v + \frac{\beta + z}{1 - \beta z}) = U(z) + \\
 & \frac{\epsilon^2}{2} \frac{d}{dz} \left[(1 + z^2) \frac{d}{dz} (1 + z^2) U(z) \right] \\
 & \beta = \tan \lambda_0
 \end{aligned} \tag{27}$$

となり、この函数微分方程式の解は λ の分散 ϵ^2 が λ_0^2 に比べ充分小さいとき

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left[(1+z^2) \frac{d}{dz} (1+z^2) V_0(z) \right] \rightarrow \\ v \frac{\frac{2}{\beta} z^2 + 4z - \frac{2}{\beta}}{(1+z^2)^2} + O(v^2) \end{aligned} \quad (31)$$

$$V(z) \rightarrow \frac{az^2 + bz + c}{(1+z^2)^2} \quad (32)$$

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

$$a=c=0, \quad b = -\frac{2v}{\beta^2} (1+\beta^2) = -\frac{2v}{\sin^2 \lambda_0} \quad (33)$$

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。

$$\begin{aligned} L &= \langle \ell_n | \frac{A_{n+1}}{A_n} |^2 \rangle = \langle \ell \frac{1+z_{n+1}^2}{1+(z_{n+1}+v)^2} \rangle \\ &= -\langle \ell_n \left(1 + \frac{2v z_{n+1} + v^2}{1+z_{n+1}^2} \right) \rangle \\ &= -v \langle \frac{2z}{1+z^2} \rangle + O(v^2) \end{aligned}$$

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

となり v が 1 に比べ充分小さい時 λ の分散及び v^2 に比例し常に正值である。興味があるのは 1) 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 & Roberts⁹⁾ 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

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

$$z_{n+1} = \frac{x_{n+1}}{x_n} \quad \text{とおくと}$$

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

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

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

となる。(ただし原子の質量 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 Rubin¹⁰⁾ により取扱われた。波は入射波の transmission を initial value problem として研究し $t \rightarrow \infty$ 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 の正值性を使って論ずる。

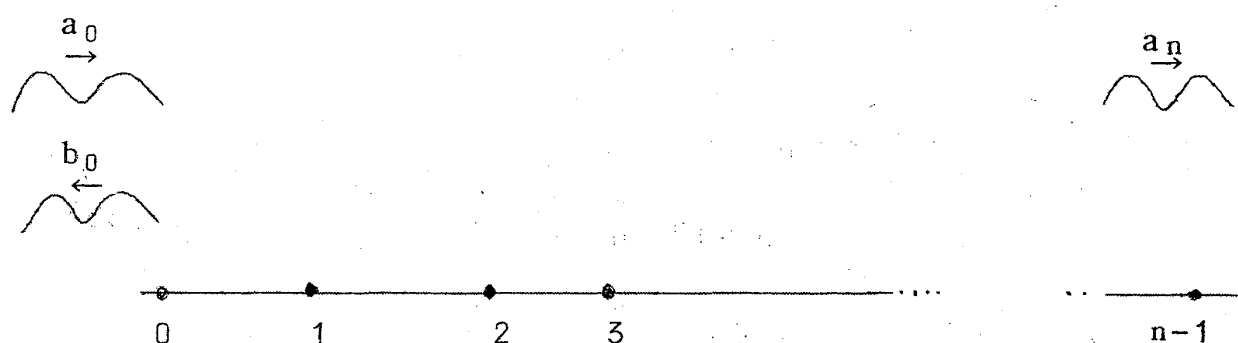


Fig. 1.

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

$$a_{i+1} = T_{11}^{(i)} a_i + T_{12}^{(i)} b_i \quad (40)$$

$$b_{i+1} = T_{21}^{(i)} a_i + T_{22}^{(i)} b_i$$

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

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

(40) の繰返しにより

$$a_n = M_{11} a_0 + M_{12} b_0 \quad (42)$$

$$b_n = M_{21} a_0 + M_{22} b_0$$

が得られるが上の matrix M も又 unimodular 性を持つ

$$\begin{aligned} M_{11} M_{22} - M_{12} M_{21} &= 1 \\ M_{11} &= M_{22}^*, M_{12} = M_{21}^* \end{aligned} \quad (43)$$

問題の条件は右方から入射波が来ないのであるから

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = 0 \quad (44)$$

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

$$\frac{|a_n|^2}{|a_0|^2} = \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (45)$$

が得られる。matrix M は n 個の matrix の積

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

である。指数因子 L が正の時 $n \rightarrow \infty$ 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 $|a_n|^2 \rightarrow 0$ 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

まとめると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

広田 徹

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 関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。 $\lambda = \pi$ に近づくとつれ、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 & Roberts⁹⁾ 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值であり、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. No. 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