2) 実験については，3) の Referenos 13〜17 参照

3) A. Kawabata, Prog. Theor. Phys. 1 (1975), 45

Hubbard model の任意に詰まったバンド及び構造不規則な系に対する解

東大・理　青 木 秀 夫

上 村 洸

§1. まえがき

Hubbard model の物理的性質を調べる場合に，従来しばしば alloy analogy による CPA に対応する近似が行われてきた。Alloy analogy[1,2] では，σ スピン電子の電子構造をみる時には $-\sigma$ スピン電子を各格子に固定させ，その不規則ポテンシャル中を一体的に σ スピンが運動すると見做す。しかし，電子は $\pm\sigma$ スピン双方が相互作用しながらダイナミカルに運動しているから，ダイナミカルな効果を考慮する必要がある。我々はその効果が Hubbard 近似[1] において CPA に比べ如何なる役割りを演じているかを，先ず任意につまったバンドについて解析し[3] 明確にした。さらに Hubbard model を不純物帯に応用する為に，不純物帯の本質的特徴の一つである構造不規則性を持つ系について，やはりダイナミカルな効果を入れて解き,[4] CPA との比較や金属非金属転移について論じた，用いた Hubbard 近似は，フェルミ面での自已エネルギーの振舞等について不合理な点も指摘されているが，金属非金属転移の overall な特徴をグリーン関数を用いて調べる為には適当であろうと思われる。

§2. 任意の n_σ に対する電子構造

CPA と Hubbard 近似の差をはっきりさせる為に，half-filled ($n_\uparrow = n_\downarrow = ½$) バンドから n_σ をずらせて電子構造を求める。Hubbard 近似では自己エネルギー Ω^σ は 3 項の和として表わされており，最初の項が CPA に対応し，resonance broadening

と云われる次の２項が電子のダイナミカルな運動に対応する。これらについて，n_σ を無限小変化させた時のバンドの変化をみる為に，グリーン関数 G^σ の $n_{-\sigma}$ 及びエネルギー（z）に関する微分，$\partial G^\sigma/\partial n_{-\sigma}$，$\partial G^\sigma/\partial_z$ を計算する。例として非摂動の状態密度にに半ダ円形のものをとると，上記２つの量は以下の様に解析的に求められる：

$$\frac{\partial G^\sigma}{\partial n_{-\sigma}} = -\frac{\partial F^\sigma}{\partial n_{-\sigma}}\Pi, \quad \frac{\partial G^\sigma}{\partial z} = -\frac{\partial F^\sigma}{\partial z}\Pi, \tag{1}$$

$$\frac{\partial F^\sigma}{\partial n_{-\sigma}} = \frac{\frac{1}{4} - (z-\Omega^\sigma)^2}{(z-\Omega^\sigma)^2 - \frac{1}{4}(1-\Pi/G^{\sigma 2})}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial F^\sigma}{\partial z} = \frac{\frac{1}{4} + (z-\Omega^\sigma)^2}{(z-\Omega^\sigma)^2 + \frac{3}{4}(1-\Pi/G^{\sigma 2})} \tag{3}$$

ここで F^σ は locator，$\Pi = \sum_k G_k^\sigma/N$. 一方，対応する式は CPA では (2), (3)式において各々分母を共に $(z-\Omega^\sigma)^2+\frac{1}{4}(1-\Pi/G^{\sigma 2})$ としたものになり，この差は，resonance broadening の有無を直接反映している。これから，$\partial G^\sigma/\partial z$ の発散点に対応するバンド端において，Hubbard 近似では $\partial G^\sigma/\partial n_{-\sigma}$ は有限となり各 Hubbard サブ・バンドの状態密度の高さのみが n_σ の変化と共に変わるのに対し，CPA では $\partial G^\sigma/\partial n_{-\sigma}$ はバンド端で発散し，状態密度の高さ，巾がともに散乱体の濃度の平方根に比例することが示される。これらの振舞は n_σ の有限の変化に対しても実際数値計算で確かめられる。[3,5]

§3.　構造不規則系

この系に対しても，やはりダイナミカルな効果は重要な差異を生む事がわかる。モデルとしては水素 1s 型波動関数をもつドナーが空間的に全く不規則に配置された系をとる。不純物の配置に関する集団平均をとる為に，locator－interactor 展開

$$G_{ii}^\sigma = \frac{1}{F_i^\sigma}\left(1+\sum_\ell \frac{t_{i\ell}\, t_{\ell i}}{F_\ell^\sigma\, F_i^\sigma} + \cdots\cdots\right) \tag{4}$$

から出発する。これから，高濃度で良い近似である，松原－豊沢ダイアグラム法を 応用し不規則な t_{ij} に関する和を実行すると，結果として集団平均された G^{σ} に対し

$$F^{\sigma}(z) = z + \frac{1}{2} - n_{-\sigma} - \frac{(1-n_{-\sigma})\,n_{-\sigma}}{z + n_{-\sigma} - \frac{1}{2} - \Omega^{\sigma}} \quad , \tag{5}$$

$$\Omega^{\sigma}(z) = \Omega'^{\sigma}(z) + \Omega'^{-\sigma}(z) - \Omega'^{-\sigma *}(-z) \quad , \tag{6}$$

$$\Omega'^{\sigma}(z) = F^{\sigma} - 1/G^{\sigma} \quad , \tag{7}$$

$$F^{\sigma}(z) = V_0 + \frac{1}{G^{\sigma}} - \frac{8i}{3} V_0 \sum_{j=1}^{3} \frac{b_j^{\sigma}}{(1+b_j^{\sigma 2})^2} \tag{8}$$

を得る。 b_j^{σ} は $(1+b^2)^3 = -V_0\ p\ G^{\sigma}$ の根。(6) 式で右辺第2，3項を無視する事に対応するCPA近似[6,7] と比較して，状態密度の非対称性が失われ，Tailing や motional narrowing を起こす事が期待され，実際数値計算でも確められる。Si：P に対して，有効ボーア半径の実験値を用いて金属非金属転移点の実験値と理論値を比較すると約½の因子の範囲で一致する。伝導帯の影響についても検討中である。

参 考 文 献

1) J.Hubbard: Proc. Roy. Soc. A **281** (1964) 401.

2) B.Velicky, S.Kirkpatrick and H.Ehrenreich: Phys. Rev. **175** (1968) 747.

3) H.Aoki and H.Kamimura: J.Phys. Soc. Japan **39** (1975) 1169.

4) H.Aoki and H.Kamimura: J.Phys. Soc. Japan **40** (1976) 6.

5) L.C.Bartel and H.S.Jarrett: Phys. Rev. **B10** (1974) 946.

6) M.Kikuchi: J.Phys. Soc. Japan **25** (1968) 989.

7) F.Yonezawa, M.Watabe, M.Nakamura and Y.Ishida: Phys. Rev. **B10** (1974) 2322.