

Variable Range Hopping 伝導領域での磁気抵抗

—— 状態内クローン相関の効果 ——

東大・理 黒部篤・上村光

Variable range hopping 伝導領域での磁気抵抗は、状態内クローン相関の効果による。正になる。さらに、Anderson 局在状態での局在長のエネルギー依存性を考慮すれば、磁気抵抗へ負の寄与がある。IT-Ta_{1-x}Se₂系での磁気抵抗の実験結果は、両者の効果として定性的に理解できる。

§1. 序論

山口・青木・上村¹⁾は、中間濃度領域で、様々な電子相関の大きさを評価し、Anderson 局在状態間の電子相関のうちで、状態内相関が最も大きい事を示し、次のハミルトニアンを提唱した。

$$\mathcal{H} = \sum_{i\sigma} E_i \hat{n}_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad \text{----- (1)}$$

ここで、 i は Anderson 局在状態を意味し、 E_i , U_i , $\hat{n}_{i\sigma}$ は各々一電子エネルギー、状態内相関、number operator を表わしている。 E_i はランダムな量であり、 U_i は一般に E_i に依存する。状態内相関は、電子比熱の enhancement, 低温での Curie 帯磁率といった物性に反映している。又一方、状態間相関が低温での比熱の異常に重要な役割を演じている事は、本研究会で、竹森・上村

により報告されている。ここでは (1) のハミルトニアンを採用し、状態内相関の *variable range hopping* 伝導への効果をパーコレーション理論²⁾ により計算する。ただし、 U_i の E_i 依存性は簡単のため無視し、 $U_i = U$ とおく。特に、石炭気抵抗への効果を議論し、 $1T-TaS_{2-x}Se_x$ の実験結果と比較する。

§2. ホッピング過程

状態内相関のある場合の Anderson 局在状態は、(i) 空の状態 (U0 状態)、(ii) 一電子占有状態 (S0 状態)、(iii) 二電子占有状態 (D0 状態) の 3 つのタイプがある。S0 状態に、逆向きスピンをもち電子をもち込んで、D0 状態をつくると、もち込んだ電子は状態内相関により $E_i + U$ のエネルギー準位を占める。この時に注意すべき事は、もち込んだ電子は S0 状態よりもゆるく束縛され、空間的に広く局在している事である。これを表わすために S0 及び D0 状態の局在長を各々 ξ_1, ξ_2 ($\xi_2 > \xi_1$) と書く。 ξ_1, ξ_2 は一般にエネルギー E_i に依存するが、しばらくの間、簡単のために、エネルギーには依存せず一定であると仮定する。

上述の 3 つの局在状態に対して、次の 4 つのホッピング過程が存在する。

- (1) S0 から U0 状態への過程
- (2) S0 から S0 状態への過程

(3) DO から UO 状態への過程

(4) DO から SO 状態への過程

ただし、ここで spin flip 過程は無視する。従って (2) の過程では、始状態に於て、2つの SO 状態のスピンは互いに反平行

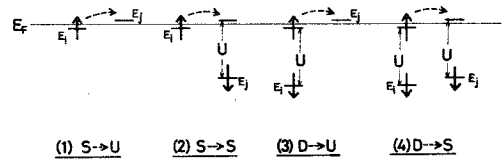


図 1

である事が要求されている。この事情を四示したのが「図 1」である。これら 4 過程は、各々、図 1 に示したエネルギー近傍で最も起こりやすく、どの過程もホッピング伝導に寄与する。(ここで、状態内相関 U は E_i の分布中より小さい場合を考えている。)パーコレション理論を使って、電気抵抗の温度依存性を、低温極限で計算すると、3次元では次のようになる。

$$\rho \propto \exp(T_0/T)^{1/4} \quad \text{----- (2)}$$

$$T_0 = 13.2 \times \frac{1}{\nu k_B} \frac{\xi_1^3 + 3\xi_2^3}{(\xi_1^3 + \xi_2^3)^2 + 4\xi_2^6} \quad \text{----- (3)}$$

ここに ν は状態密度である。(2)式は、状態内相関の無い時の variable range hopping 伝導で良く知られている Mott の $1/4$ 乗則³⁾が、今の場合も成立する事を示しているが、(3)式に見られるように、 T_0 は ξ_1, ξ_2 の両方の局在長に依存するように拡張されている。計算においては、intrinsic hopping rate は Miller and Abrahams⁴⁾ の表式を仮定した。又、hopping rate

を決める局在長は、(1)の過程では ξ_1 、(2)~(4)では ξ_2 としている。

§3. 石磁気抵抗

次に、石磁場中で、4つのホッピング過程にどのような変化が起こるか調べる。石磁場を印加すると SO 状態の free spins は石磁場と平行になろうとする。その結果、SO → SO 過程は起こらなくなる。何故なら、ホッピング後に出来る DO 状態が spin singlet にならないからである。ところで、SO → SO 過程と DO → UO 過程とは互いに逆過程になっているために、詳細つり合いの原理から同じ遷移確率でホップする。つまり、石磁場による SO → SO 過程の抑制は、DO → UO 過程の抑制をも意味する。従って石磁気抵抗 $\frac{\Delta\rho(H)}{\rho(0)}$ は、これら2過程の抑制により正になる。様々な温度での石磁気抵抗の数値計算例

を示したのが図2である。計算は(2)式を導出した時と同じパーコレーション理論を用い、3次元で行なっている。石磁気抵抗は、正の符号で、石磁場 H の増加に比例

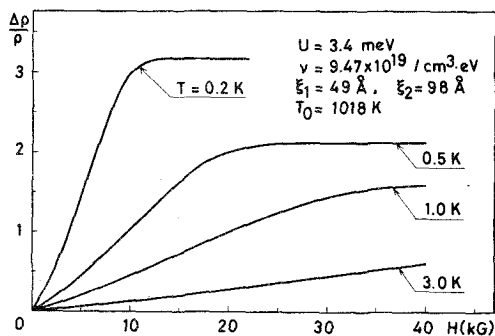


図 2

して増加し、ある石磁場 H_{sat} 以上で飽和する。飽和値は、

$$\frac{\Delta P(H)}{P(0)} \Big|_{\text{sat}} = \exp \left[13.2 \left(\frac{1}{\nu k_B T} \right)^{\frac{1}{4}} \left\{ \left(\frac{\xi_1^3 + \xi_2^3}{\xi_1^6 + \xi_2^6} \right)^{\frac{1}{4}} - \left(\frac{\xi_1^3 + 3\xi_2^3}{(\xi_1^3 + \xi_2^3)^2 + 4\xi_2^6} \right)^{\frac{1}{4}} \right\} \right] - 1. \quad \text{----- (4)}$$

で与えられる。温度の減少に伴って、飽和値は増加し、 H_{sat} は減少する。

§4 IT-TaS_{2-x}Se_x系との比較

IT-TaS_{2-x}Se_x系は、低温で *variable range hopping* 伝導を示す。この温度領域の高温側での石磁気抵抗は磁場の増加に伴って、正で立ち上がり、最大値を通過した後減少する。一方低温側では、負の石磁気抵抗だけが観測されている。^{5), 6)} 福山・芳田⁷⁾はこの負の石磁気抵抗を説明するために、Anderson 局在状態の広がり ξ_i がエネルギー E_i に依存する事を考慮した。我々は§3の立場に立ち、これと同じ機構を取り入れた計算を行なった。

図1にみるように、SO → UO 過程は、 $E_i = E_F$ 近傍で起こる。石磁場中では、上向きスピンの電子に対する一電子状態のエネルギー準位は、 $E_i - \mu_B H$ となるから、ホッピングは $E_i - \mu_B H = E_F$ 近傍で起こる。よって移動度端 E_c と E_i との差、 $E_c - E_i$ が石磁場とともに減少する事になり、局在の広がりを増す。この事は、ホッピングの遷移確率を増加

させるから、石磁気抵抗へは負の寄与がある。実際の数値計算例を図3に示す。

この計算は2次元系で行ない、 $\xi_1(E_i) \propto (E_c - E_i)^{-1}$ を仮定している。石磁気抵抗が石磁場の増加に従って、正から負へと移行する様子は、 $1T-TaS_{2-x}Se_x$

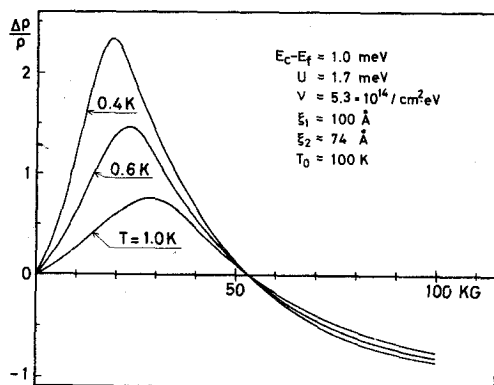


図3

の実験を再現している。さらに、正の部分の寄与について調べてみると、(3)式と(4)式を比べて T_0 が増加すると (ξ_1, ξ_2 が減少)、 $\frac{\Delta\rho}{\rho}|_{sat}$ も増加するから、 T_0 の大きい方が正の石磁気抵抗も大きい事が結論できる。(この定性的な議論は2次元でも3次元でも変わらない。) 実験においても、 $1T-TaS_2$ にSe dopingをして、 T_0 を増加させると、石磁気抵抗の正の部分が増加する事が観測されている。⁵⁾

状態内相関だけを考慮した今の計算では、 $T \rightarrow 0$ に従って、 $\Delta\rho/\rho|_{sat} \rightarrow \infty$ となるが、実験的には、 $T \leq 0.5K$ で負の石磁気抵抗のみになる。これは、今の formalism で落とした、状態間のクーロン相互作用の効果であると考えられる。充分低温では、direct exchange や kinetic exchange といった状態間相互作用により、SO状態のスピン同士

が強く相互作用し合う。⁸⁾ その結果、石磁場を加えても、SO状態のスピニが石磁場の方向に整列しなくなり、石磁気抵抗へ正の寄与をしたときの機構が働かなくなる。従って、負の寄与だけが残ると考えられる。

References

- 1) E.Yamaguchi, H.Aoki, H.Kamimura, J. Phys. c 12, 4801(1979): See also a review by H.Kamimura, Phil. Mag. B 42 763 (1980).
- 2) M.Pollak, J. Non-Cryst. Sol. 11, 1 (1972).
- 3) N.F.Mott and E.A.Davis, "Electronic Processes in Non-Crystalline Materials" Clarendon Press, Oxford 2nd ed. (1979).
- 4) A.Miller and E.Abrahams, Phys. Rev. 120, 745 (1960).
- 5) Y.Onuki, R.Inada and S.Tanuma, Physica 99 B, 177 (1980).
- 6) N.Koayashi and Y.Muto, Solid State Commun. 30, 337 (1979).
- 7) H.Fukuyama and K. Yoshida, J. Phys. Soc. Japan 46, 102 (1979).
- 8) 竹森,上村; 本研究会報告集