一次元無秩序系における動的電気伝導度の計算機実験

東北大 理　金 昌一

一次元無秩序のアンダーソンモデル（n.nホッピングV，サイトエネルギー $\{\varepsilon_n\}$；$-W/2 \le \varepsilon_n \le W/2$）の動的電気伝導度$\sigma(\omega)$をMacKinnon[1]の方法を用いて，$10^6$ サイトまで計算機実験によって求めた。$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$は久保の公式から，Nサイト系に対して

$$\mathrm{Re}\,\sigma^{(N)}(\omega)=\frac{1}{\omega}\int_{E_F-\omega}^{E_F}dE\,\mathrm{Re}\,\sigma_E^{(N)}(\omega),\quad \mathrm{Re}\,\sigma_E^{(N)}(\omega)=\frac{2e^2\hbar}{\pi Na}\mathrm{Tr}\left[v\,\mathrm{Im}\,G_\Gamma^{(N)}(E+\omega+i\gamma)\,v\,\mathrm{Im}\,G_\Gamma^{(N)}(E+i\gamma)\right]$$

ここで $v=\frac{i}{\hbar}[H,x]$ は速度演算子，$x=\sum_{n=1}^{N}x_n|n\rangle\langle n|$は位置演算子，$x_n=na$，$a$は格子定数であり，$G_\Gamma^{(N)}(z)=(z-H^{(N)})^{-1}$ である。有限系を扱うために有限なエネルギーEの虚数部γを導入しなければならない。$\sigma_E^{(N)}(\omega)$ は x表示でつぎのように書くことができる。

$$\sigma_E^{(N)}(\omega)=\frac{e^2}{2\pi\hbar Na}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}(x_n-x_m)^2\left[\omega^2\langle n|G_{\Gamma\omega}^{(N)}|m\rangle\langle m|G_\Gamma^{(N)}|n\rangle-(\omega+2i\gamma)^2\langle n|G_{\Gamma\omega}^{(N)}|m\rangle\langle m|G_\Gamma^{(N)*}|n\rangle\right]$$

ここで $G_{\Gamma\omega}^{(N)}=G_\Gamma^{(N)}(E+\omega+i\gamma)$，$G_\Gamma^{(N)}=G_\Gamma^{(N)}(E+i\gamma)$ である。MacKinnon の方法を動的な場合に拡張して，$G_\Gamma^{(N)}(z)$の漸化式から $\sigma_E^{(N)}(\omega)$の漸化式を求め，N=1から出発して非常に大きな系の$\sigma_E^{(N)}(\omega)$を求めることが可能である。我々は$\sigma_E^{(N)}(\omega)$を$E=E_F=0$（E_Fはフェルミエネルギー）の場合に$N=10^6$，20 samplesについて計算した。計算の結果，$\sigma_E^{(N)}(\omega)$のE依存性は小さいので$\sigma^{(N)}(\omega)\simeq\sigma_E^{(N)}(\omega)$（$E=E_F$）とした。$W/V=1$ と $W/V=5$ の場合についての結果をそれぞれ図1と図2に示した。横軸はτ_0（Born近似で緩和時間；$\tau_0=12\hbar V/W^2$）で，縦軸は$\sigma_0=(e^2/\pi\hbar)2v_F\tau_0$ でスケールした。無秩序の度合の小さい領域（$E_F\tau_0\gg 1$）で有効なBerezinskii[2]の厳密解（図の実線[3]，波線はDrudeの理論）と比較して，$W/V=1$の場合はωの広い範囲でよい一致を示している。$W/V=5$（$E_F\tau_0\sim 1$；$E_F=2V$）の場合でさえもバンド端の効果が現れている他は，Berezinskii の解と計算機実験とは非常によく一致している。

(1) A. MacKinnon : J. Phys. C13 (1980) L1031

(2) V. L. Berezinskii : Sov. Phys. JETP 38 (1974) 620

(3) A. A. Gogolin and V. I. Melnikov : Phys. Stat. sol. (b) 88 (1978) 377

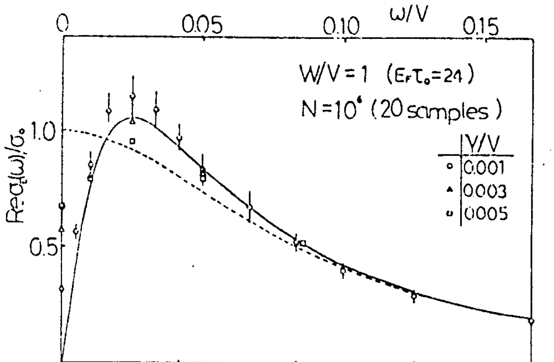

図1

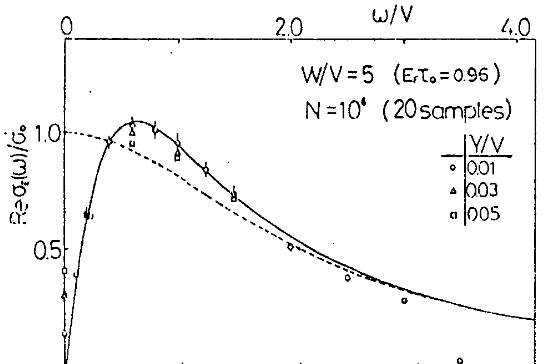

図2