京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

京都大学
KYOTO UNIVERSITY

Title	二次元準結晶の伝導と局在(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告)
Author(s)	上田, 和夫
Citation	物性研究 (1987), 48(2): A59-A61
Issue Date	1987-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/92497
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

Kyoto University

二次元準結晶の伝導と局在

東京大学工学部　　　上田和夫

§1　はじめに

電子線回折による五回対称性の発見は、準結晶の概念をもたらした。準結晶では、われわれの慣れ親しんでいるBlochの定理が成り立たないため、その電子状態にはいろいろな定性的に新しいことが期待される。最も単純な準結晶としては、一次元Fibonacci格子があり、その電子状態は、伝送行列を始めとするさまざまな方法によって詳しく調べられている。それによれば、エネルギースペクトルはCantor setであり、波動関数はcriticalになっていて、局在もひろがりもしていないことが解っている。二次元における典型的な準結晶は有名なPenrose格子である。われわれは、Penrose patternの一部を系統的に切り出し、周期的に平面をおおいえることを見いだした。この周期的Penrose格子の単位胞は、系統的に大きくすることができ、こうして得られる系列は、無限のPenrose格子に対するある種の最良近似と考えることができる。われわれは、この周期的Penrose格子を用いて電子状態の数値計算を行ったが、その結果は　エネルギースペクトルは singular continuous であり波動関数はcriticalになっていることを示唆している。（文献 1）

周期性のない系であるPenrose格子に対して、最も興味のある物理量は　おそらく伝導であろう。伝導は、エネルギースペクトルと波動関数の両者によっており、それらが特異な振舞いをしめすことは、伝導に対する興味を増加させる。しかしながら、Penrose格子の伝導を議論するのは、簡単ではない。われわれは、二次元準周期系の一番簡単なものとして二次元Fibonacci格子を考えた。（文献 2）それは二次元正方格子でポテンシャルが両方向Fibonacciの規則で配列されているものである。

§2　エネルギースペクトル

二次元Fibonacci格子のポテンシャルV_{nm}としては、いろいろなものがかんがえられるが、最も簡単なのは分離可能な場合である、$V_{nm}=V_n-V_m$。　ここでV_nは、Fibonacci列 $\{\tau,1,\tau,\tau,1,...\}$ の規則に従って配列されたポテンシャルでτ-サイトでV，1-サイトで 0を取る。このとき波動関数は一次元のものの積になり、エネルギー固有値は和で与えられる。一次元のエネルギースペクトルはCantor集合であり、波動関数はcriticalなので、ただちに二次元Fibonacci格子のエネルギースペクトルが singular continuous であり、その波動関数はcriticalであることが解る。

さてここで興味のあるのは、エネルギースペクトルの測度である。甲元氏達は、全バンド幅の指数δをポテンシャルの関数として計算し、δが0から連続的に増加することを示している。これはスペクトルの測度が常に0であることを意味している。二次元Fibonacci格子では、この指数δは、弱いポテンシャルに対しては0であり、強いポテンシャルに対しては有限で、臨界値が存在することが数値的にわかった。すなわち弱いポテンシャル領域ではスペクトル測度が有限なのに対し、強いポテンシャル領域では測度が0になり、その間に転移が存在している。　このことは、一次元ではすべてのFibonacci鎖は一つのクラスに属していたのに対し、二次元では二つ（またはそれ以上）のクラスが存在しポテン

シャルやエネルギーなどの関数として移り変わり得ることを意味し、例えば二次元Penrose格子のスペクトルもエネルギーによって測度が有限の領域と0の領域とが存在し得ることを示唆している。

§3　二次元Fibonacci格子の伝導

伝導はエネルギースペクトルと波動関数の双方に依存した物理量であるが二次元Fibonacci格子はその議論に特に適した系である。それは伝送行列の方法を簡単に応用することが出来るからである。この場合一列を単位としてそれに垂直な方向に伝送行列の方法を用いる。伝導を議論するにはM×Nの有限の二次元Fibonacci格子の両端に幅Mの普通の格子をつけたチューブ（M方向に周期的境界条件）を考え、そのconductanceをLandauerの表式をもちいて計算する。このmultichannel Landauer表式は伝送行列で表現できる。（Pichardの表式）　われわれはconductanceをシステムの大きさ、及びポテンシャルの強さを変えて計算した。その結果conductanceはミクロなscaleシステムサイズを変えると大きくゆらぎ、conductance自体はwell definedであるが、長さの逆数に比例すべきconductivityは、定義できないことがわかった。これは、 singular continuous なスペクトルとcriticalな波動関数の反映と考えられる。

conductanceのゆらぎはポテンシャルが強い程小さいが、強いポテンシャルの領域でも、e^2/hを単位として、一程度の下限が存在するように見える。ランダムネスの存在する場合mesoscopicな系でconductanceがe^2/h程度のゆらぎを示す現象はStoneとLeeのuniversal conductance fluctuationとして知られている。二次元Fibonacci格子はdeterministicな系であり、そのゆらぎもシステムサイズを変えたときのもので、ランダムネスに起因するuniversal conductance fluctuationとは、物理的メカニズムは全く違うと考えられる。ただ二つのシステムは波動関数がcriticalという共通性を持っていることを指摘しておきたい。ところでImryは、universoal conductance fluctuation に関してPichardの表式に基ずき示唆に富む指摘をしている。彼によれば伝送行列がランダム行列でその固有値がDysonのorthogonal ensembleであれば、universal conductance fluctuationが期待でき、このときゆらぎは0.296になる。いま、ミクロなscaleで長さの異なるシステムに対する伝送行列の集団を考えると、一種のランダム行列と考えることが出来この系におけるconductanceのゆらぎを理解することが出来る。先にスペクトル測度にポテンシャルの強さによって二つの領域が存在することを指摘したが、伝導に対してもその様な臨界値が存在するか否かは、更に大きな系で収束の様子を見る必要があり、今後の課題である。

§4　おわりに

二次元準結晶の電子状態と伝導の問題を調べるために最も簡単な系として二次元Fibonacci格子を考え、そのエネルギースペクトルとconductanceを議論した。ここで得られた二つの概念、スペクトル測度が0と有限の二つのレジームの存在とconductanceの固有のゆらぎ、が二次元Penroseでどの様に現れるかは大変興味深い問題である。最近，一次元xyスピン系の熱力学量が計算され比熱、帯磁率に通常の結晶では存在しない振動項があることが示されている。マクロな系におけるゆらぎの存在は、おそらく準結晶の物理量を特徴

付ける一つの重要な概念であるとおもわれる。

文献

(1) H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda and T. Tokihiro, J. Phys. Soc. Jpn. 55, 1420 (1986).

(2) K. Ueda and H. Tsunetsugu, preprint.