

Lloyd 模型における電気伝導率

東大教養物理 齋 藤 基 彦

(7月30日受理)

§ 1. はじめに

最近厳密に解き得る3次元不規則格子の模型が Lloyd¹⁾ により提案された。この模型は次のようなハミルトニアンによって記述される：

$$\mathcal{H} = \sum_n E_n C_n^+ C_n + \sum_{nm} V(n-m) C_n^+ C_m \quad (1)$$

ここで n, m は結晶の格子点, C_n^+, C_n は格子点上の電子の生成・消滅演算子, E_n は n におけるエネルギー準位, $V(n-m) = V(m-n)$ は遷移エネルギーである。 E_n はランダムな変数でその確率分布は格子点間の相互作用の無い Lorentz 分布

$$P(\{E_n\}) dE_1 dE_2 \dots = \prod_n \frac{(\Gamma/\pi) dE_n}{(E_n - \Delta)^2 + \Gamma^2} \quad (2)$$

で与えられる。このような模型で Lloyd は電子の局在性を議論し, Anderson²⁾ の意味で電子は常に局在しない事を結論した。すなわち時刻 $t=0$ で m に局在するような波束を用意すれば $t=\infty$ ではアンサンブル平均した波束の振巾 $A_m(t)$ は必ず0になる事を示した。しかしながらその直後 Anderson³⁾ 自身が批判したようにアンサンブル平均した波束の振巾と電子の局在性とは直接結びつかない事, また後に述べるように $V(n-\ell) = 0$ でも $A_m(t) \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$) となる事などを考えると Lloyd の得た結論は十分確信の附けるものではない。

以後混乱を避けるため, 我々は局在という言葉をも $Mott$ ⁴⁾ のいうようにアンサンブル平均した静的伝導率 σ が0 という意味で用いる事にする。

Lloyd の模型は $V(n-m)$ が $\{E_n\}$ の値に依存せずランダムな変数ではないので或る種の理想化であるが, 後に述べるように1体のグリーン関数が厳密に得られるので興味ある模型といえよう。我々はこの模型の電気伝導度を調べた

ので結果を報告する。

§ 2. 1体のグリーン関数

電気伝導率を議論する前にまず1体のグリーン関数を調べておこう。温度グリーン関数 $G_{nl}(i\epsilon_r)$ ($\epsilon_r = (2r+1)\pi T$, r は整数, T はエネルギー単位で測った温度)は運動方程式

$$\sum_n \{ (i\epsilon_r - E_n) \delta_{ln} - V(\ell-n) \} G_{nm}(i\epsilon_r) = \delta_{lm} \quad (3)$$

をみたす。従ってロケータ

$$g_n(i\epsilon_r) = [i\epsilon_r - E_n]^{-1} \quad (4)$$

を定義すれば $G_{nm}(i\epsilon_r)$ は V について展開できて

$$\begin{aligned} G_{nm} = & \delta_{nm} g_n + g_n V(n-m) g_m + \sum_{\ell} g_n V(n-\ell) g_{\ell} \\ & \times V(\ell-m) g_m + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

となる。ただし簡単のためエネルギー引数 $i\epsilon_r$ は省略した。(5)の各項を(2)によって平均すればアンサンブル平均された1体のグリーン関数 $\langle G_{nm} \rangle$ が得られるが、その際公式

$$\begin{aligned} \langle g_n^{\nu}(i\epsilon) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_n(\Gamma/\pi)}{(E_n - \Delta)^2 + \Gamma^2} \frac{1}{(i\epsilon - E_n)^{\nu}} \\ &= g^{\nu}(i\epsilon) \quad (\nu: \text{整数}) \end{aligned} \quad (6)$$

に留意する。ただし $g(i\epsilon)$ は平均されたロケータで

$$g(i\epsilon) = [i\epsilon - \Delta + i\Gamma S(i\epsilon)]^{-1} \quad (7)$$

ここで

$$S(z) = \text{sign}(\text{Im } z),$$

$$\text{sign}(y) = \begin{cases} 1 & (y > 0) \\ -1 & (y < 0) \end{cases}$$

この事は $\langle G_{nm} \rangle$ を考えるとき、(5)の各項に現われる g_n を全て g で置き換えれば良い事を意味する。従って (3) で

$$i\epsilon - E_n \rightarrow g^{-1}(i\epsilon)$$

$$G_{nm} \rightarrow \langle G_{nm} \rangle$$

とした式が成立するから $\langle G_{nm} \rangle$ のフーリエ変換 $G_K(i\epsilon)$ がただちに得られて、

$$\begin{aligned} G_K(i\epsilon) &= \sum_n \langle G_{nm}(i\epsilon) \rangle \exp \{ -iK \cdot (n-m) \} \\ &= [g^{-1}(i\epsilon) - E(K)]^{-1} \end{aligned} \quad (8)$$

となる。¹⁾ ここで

$$E(K) = \sum_m V(m) \exp(-iK \cdot m) \quad (9)$$

Lloyd の議論した格子点 n における波束の振巾 $A_n(t)$ は

$$A_n(t) = i \int_{-\infty}^{\infty} \langle G_{nm}(E^+) \rangle e^{-iEt} \frac{dE}{2\pi} \quad (10)$$

で与えられる。ただし $E^{\pm} = E \pm i0^+$, 0^+ は正の微小量, $\hbar = 1$ の単位系を用いた。従って $V(\ell) = 0$ としても

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A_n(t) = 0 \quad (11)$$

となり、電子の局在性を議論するのには十分でない。何故なら $V(\ell) = 0$ ならば $\sigma = 0$ となるはずだからである。次の節で我々は電気伝導度を調べる事にする。

§ 3. 電気伝導率

アンサンブル平均した静的伝導率 σ は

$$\sigma = \lim_{\omega \rightarrow 0} [K(i\omega_\alpha = \omega^+) - K(0)] / i\omega \quad (12)$$

から得られる。ここで $K(i\omega_\alpha)$ ($\omega_\alpha = 2\alpha\pi T$; α は整数) は 2 体の温度グリーン関数である。ハミルトニアン (1) は 1 体であるので $K(i\omega_\alpha)$ は

$$K(i\omega_\alpha) = -\frac{2}{\Omega} \sum_{h\ell mn} (\ell|J_x|m) (n|J_x|h) \times T \sum_r \langle G_{mn}(i\epsilon_r) G_{h\ell}(i\epsilon_r + i\omega_\alpha) \rangle \quad (13)$$

と書ける。⁵⁾ ただし Ω は系の体積, 係数 2 はスピン縮退を考慮したもので, J_x は電流演算子の x 成分, 強い結合の近似では

$$(\ell|J_x|m) = ie(\ell_x - m_x) V(\ell - m) \quad (14)$$

と書ける。(13) で 2 体のグリーン関数の平均が必要だが, ここで

$$\langle G_{mn}(i\epsilon) G_{h\ell}(i\epsilon') \rangle = \sum_{\ell', m'} \langle G_{m', n}(i\epsilon) \rangle \langle G_{h\ell'}(i\epsilon') \rangle \times \Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}(i\epsilon; i\epsilon') \quad (15)$$

によってバーテックス関数 $\Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}(i\epsilon; i\epsilon')$ を導入しておこう。(13) の r の和を標準的な方法⁶⁾ で実行すれば,

$$\begin{aligned} & T \sum_r \langle G_{mn}(i\epsilon_r) G_{h\ell}(i\epsilon_r + i\omega_\alpha) \rangle \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \sum_{\ell', m'} \{ \langle G_{m', n}(E^+) \rangle \langle G_{h\ell'}(E^+ + \omega) \rangle \\ & \quad \times \Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}(E^+; E^+ + \omega) \\ & \quad - \langle G_{m', n}(E^-) \rangle \langle G_{h\ell'}(E^+ + \omega) \rangle \Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}(E^-; E^+ + \omega) \\ & \quad + \langle G_{m', n}(E^- - \omega) \rangle \langle G_{h\ell'}(E^+) \rangle \Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}(E^- - \omega; E^+) \\ & \quad - \langle G_{m', n}(E^- - \omega) \rangle \langle G_{h\ell'}(E^-) \rangle \Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}(E^- - \omega; E^-) \} \end{aligned} \quad (16)$$

を得る。ただし $f(E)$ は Fermi-Dirac 分布関数である。次に $\Gamma_{\ell\ell'}^{mm'}$ を求めることにしよう。我々は (5) の展開を再び用い各項別に平均する事にする。

その際 (6) に加えて新たに $\langle g_n^\mu(i\epsilon) g_n^\nu(i\epsilon') \rangle$ ($\epsilon \neq \epsilon'$, μ, ν は正整数) の形の平均が必要となる。ここで,

$$\begin{aligned} \langle g_n(i\epsilon) g_n(i\epsilon') \rangle &= \frac{1}{i(\epsilon' - \epsilon)} \langle g_n(i\epsilon) - g_n(i\epsilon') \rangle = \\ &= \left\{ 1 + \frac{(S(i\epsilon) - S(i\epsilon')) \Gamma}{\epsilon - \epsilon'} \right\} g(i\epsilon) g(i\epsilon') \end{aligned}$$

に注意すれば,

$$\begin{aligned} \langle g_n^\mu(i\epsilon) g_n^\nu(i\epsilon') \rangle &= g^\mu(i\epsilon) g^\nu(i\epsilon') \\ &= \frac{1}{(\mu-1)!} \frac{1}{(\nu-1)!} \frac{\partial^{\mu-1}}{\partial(-i\epsilon)^{\mu-1}} \frac{\partial^{\nu-1}}{\partial(-i\epsilon')^{\nu-1}} \\ &\quad \times \frac{(S(i\epsilon) - S(i\epsilon')) \Gamma}{\epsilon - \epsilon'} g(i\epsilon) g(i\epsilon') \quad (17) \end{aligned}$$

を得る。勿論微分は $S(i\epsilon)$, $S(i\epsilon')$ に作用する必要はない。エネルギー変数は実軸をよぎる事はないからである。この事より, もし (17) の右辺が 0 であるならば, § 2 の議論と同様にして $\langle G_{mn}(i\epsilon) G_{nl}(i\epsilon') \rangle = \langle G_{mn}(i\epsilon) \rangle \times \langle G_{nl}(i\epsilon') \rangle$ である事が知れるから, 従って $S(z)$ と $S(z')$ が同符号であればバーテックス補正は必要なく

$$\Gamma_{\ell\ell'}^{nn'}(z, z') = \delta_{\ell\ell'} \delta_{nn'} \quad (18)$$

よって伝導率 σ を 2 つの部分に分け, (16) で $\Gamma_{\ell\ell'}^{nn'} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{nn'}$ とした部分からの寄与を σ_1 , そのおつりの寄与を σ_2 と書く事にすれば $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$ で,

$$\sigma_1 = \frac{2}{\pi\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sum_K \{ e V_x(K) \}^2 \left\{ \frac{\Gamma}{(E - E(K) - \Delta)^2 + \Gamma^2} \right\}^2 \quad (19)$$

ただし $V_x(K) = \partial E(K) / \partial K_x$ は群速度で (14) を利用した。この結果は Fermi エネルギーがどこに位置しようと $\sigma_1 > 0$ である事を示している。また

σ_2 は

$$\sigma_2 = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\pi \Gamma_L} \int dE \frac{f(E) - f(E+\omega)}{\omega} \sum_{h \ell m n \ell' m'} (\ell | J_x | m) (n | J_x | h) \times \langle G_{m'n}(E^-) \rangle \langle G_{h\ell'}(E^+ + \omega) \rangle \delta \Gamma_{\ell \ell'}^{m m'}(E^-; E^+ + \omega) \quad (20)$$

と表わされる。ここで $\delta \Gamma_{\ell \ell'}^{m m'} = \Gamma_{\ell \ell'}^{m m'} - \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'}$ ，次節で σ_2 の評価をする。

§ 4. σ_2 の評価

σ_2 の寄与は (17) の右辺をあらわに考える事によって調べられる。ここでは V に関する摂動によって調べる事にしよう。(5) の如く V で展開して $G_{nm}(i\epsilon)$ と $G_{h\ell}(i\epsilon')$ の積を作り各項別に平均をとる。勿論 σ_2 に対する寄与は $G_{mn}(i\epsilon)$ と $G_{h\ell}(i\epsilon')$ の展開の中で両者に共通の格子点が現われた場合のみを考えれば良く，(17) の右辺が 0 でないのは $S(i\epsilon)$ と $S(i\epsilon')$ が異符号の場合である。 $S(i\epsilon) < 0$ ， $S(i\epsilon') > 0$ ($\epsilon' - \epsilon = \omega_\alpha$) として一般性を失わない。さて

$$L = \sum_{h \ell m n} (\ell | J_x | m) (n | J_x | h) \times \{ \langle G_{mn}(i\epsilon) G_{h\ell}(i\epsilon') \rangle - \langle G_{mn}(i\epsilon) \rangle \langle G_{h\ell}(i\epsilon') \rangle \} \quad (21)$$

と書いて，その V の巾展開を考える際， $(n | J_x | n)$ は 0 である事に注意する。また Δ を適当にとれば $V(0) = 0$ としても一般性を失わない。このとき σ_2 は V について 2 次の寄与から始まる (図 1 参照)。あらわに書くと

$$\begin{aligned} L_2 &= \sum_{n \ell} (n | J_x | \ell)^2 V^2 (\ell - n) \{ \langle g_\ell(i\epsilon) g_\ell(i\epsilon') \rangle^2 - g^2(i\epsilon) g^2(i\epsilon') \} \\ &= \sum_{n \ell} (n | J_x | \ell)^2 V^2 (\ell - n) \frac{4\Gamma}{\omega_\alpha} \left(1 + \frac{\Gamma}{\omega_\alpha} \right) g^2(i\epsilon) g^2(i\epsilon') \quad (22) \end{aligned}$$

これを (13) に代入し σ_2 を求めると $\sigma_2 \sim \omega^{-2}$ で発散する事が知れる。従

って (21) を知るためには V の高次の項も調べなければならない。我々は静的伝導率に興味があるので、 V について巾展開し、そのうち $\omega \rightarrow 0$ で最も発散の強い項 (MDT) のみを考慮する。そのような範囲では (17) は

$$\begin{aligned} \langle g_n^\mu(i\varepsilon) g_n^\nu(i\varepsilon') \rangle &= \frac{(-)^{\mu-1} (\mu+\nu-2)!}{(\mu-1)! (\nu-1)!} \frac{2\Gamma i}{(i\omega_\alpha)^{\mu+\nu-1}} g(i\varepsilon) g(i\varepsilon') \\ &\times \{1 + O(\omega_\alpha g)\} \end{aligned} \quad (23)$$

と近似して良い。この事からわかるように MDT を得るには、

「平均すべき格子点の種類をできるだけ減らす」

という原則に従ってグラフを選べば良い。 V の偶数次の項 L_{2k} では格子点を 2 つに限ればそれが MDT を与える。図 2 に 4 次の場合を示す。奇数次の項 L_{2k+1} では格子点の数が少くとも 3 つになるので $L_{2k+1} \sim Vg \cdot L_{2k}$ の程度となり、 V が十分小さければ高次の補正になるので考える必要はない。 L_{4k} (MDT) は

$$\begin{aligned} L_{4k}(\text{MDT}) &= \sum_{n\ell} (n|J_X|\ell)^2 V^{4k} (n-\ell) \times \\ &\times \{ \langle g_n^{2k} g_n' \rangle \langle g_\ell^{2k} g_\ell' \rangle + \langle g_n g_n'^{2k} \rangle \langle g_\ell g_\ell'^{2k} \rangle \\ &- \langle g_n^{2k} g_n' \rangle \langle g_\ell^{2k-1} g_\ell'^2 \rangle - \langle g_n^2 g_n'^{2k} \rangle \langle g_\ell^2 g_\ell'^{2k-1} \rangle \\ &+ \dots\dots\dots \\ &+ \langle g_n^{k+1} g_n'^k \rangle \langle g_\ell^{k+1} g_\ell'^k \rangle + \langle g_n^k g_n'^{k+1} \rangle \langle g_\ell^k g_\ell'^{k+1} \rangle \\ &- \langle g_n^{k+1} g_n'^k \rangle \langle g_\ell^k g_\ell'^{k+1} \rangle \} \\ &= \sum_{n\ell} |(n|J_X|\ell)|^2 V^{4k} (n-\ell) \frac{4\Gamma^2}{\omega_\alpha^{4k}} (g g')^2 \times \\ &\times \{ 2 \sum_{r=0}^{k-1} ((\binom{2k-1}{r})^2 + (\binom{2k-1}{r} (\binom{2k-1}{r+1})) - (\binom{2k-1}{k})^2 \} \end{aligned} \quad (24)$$

斎藤基彦

となる。ここで $g(i\epsilon) = g$, $g(i\epsilon') = g'$ と略記した。(24) で波型カッコ内は $\binom{4k-1}{2k}$ になる。同様にして $L_{4k-2}(\text{MDT})$ も求める事ができて、結局

$$\begin{aligned} \sigma_2(\text{MDT}) = \sum_{n\ell} |(n|J_x|\ell)|^2 \frac{4\Gamma^2}{\pi\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E+\omega)}{\omega} \times \\ \times g^2(E^-) g^2(E^+) u\left(\left\{\frac{V(n-\ell)}{\omega}\right\}^2\right) \end{aligned} \quad (25)$$

を得る。ここで

$$\begin{aligned} u(y) &= \sum_{k=1}^{\infty} \binom{2k-1}{k} y^k \\ &= \left\{ (1-4y)^{-\frac{1}{2}} - 1 \right\} / 2 \end{aligned} \quad (26)$$

従って $y \rightarrow \infty$ で $u(y) \rightarrow -1/2$ となり、 $\sigma_2(\text{MDT})$ は σ_1 の表式 (19) で $E(K) = 0$ とした部分を厳密に打ち消す。より弱い発散項 (LDT) の寄与は $\sim (V/\Gamma) \sigma_2(\text{MDT})$ の程度であるから

$$\lim_{V \rightarrow 0} (\sigma/V^2) = 0 \quad (27)$$

がいえる。次に物理的意味を考察する。

§ 5. 考 察

前節の議論でバーテックス補正が重要であり、 $\omega \rightarrow 0$ の極限では補正の MDT に寄与するグラフは2つの格子点に關与するものである事がわかった。ここでその間の事情をあきらかにするため格子点1と2だけからなり、その間の遷移エネルギーが V であるような系を考えよう。この系の固有エネルギー状態は結合状態 (エネルギー E_+) と反結合状態 (E_-) であり

$$E_{\pm} = \{ E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4V^2} \} / 2 \quad (28)$$

で与えられる。動的伝導率 $\sigma_{\parallel}(\omega)$ の実部は

$$\sigma_{II}'(\omega) = \frac{2\pi |(1|J_X|2)|^2}{\Omega} \left\{ -\frac{f(E_+) - f(E_-)}{E_+ - E_-} \right\} \\ \times \{ \delta(\Delta E - \omega) - \delta(\Delta E + \omega) \} \quad (29)$$

である。ここで $\Delta E = E_+ - E_-$ は結合状態と反結合状態のエネルギー差である。従って平均伝導率は厳密に求まり

$$\langle \sigma_{II}'(\omega) \rangle = \frac{4\Gamma^2 |(1|J_X|2)|^2}{\pi \Omega} \sqrt{\frac{\omega^2}{\omega^2 - 4V^2}} \theta(\omega^2 - 4V^2) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E+\omega)}{\omega} \frac{1}{\left\{ \left(E + \frac{|\omega| - \sqrt{\omega^2 - 4V^2}}{2} - \Delta \right)^2 + \Gamma^2 \right\}} \\ \times \frac{1}{\left\{ \left(E + \frac{|\omega| + \sqrt{\omega^2 - 4V^2}}{2} - \Delta \right)^2 + \Gamma^2 \right\}} \quad (30)$$

ここで

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

$\Delta E \geq 2|V|$ であるため伝導率は $\omega < 2|V|$ で 0 になる。(30) より明らかなように V について形式的に (30) を展開すれば MDT は (25) に一致する。

しかしながらこのような方法を LDT についても適用するのは困難なので $\sigma_2(\omega=0)$ が完全に σ_1 を打ち消すかどうかは現在のところ結論を出すに至らない。

§ 6. 結 び

以上我々は Lloyd 模型の伝導率について調べた。Mott の予言⁴⁾ に対するはっきりとした答は得られなかったが、いくつかの点を学んだ。

グリーン関数法の応用という見地からいうと 1 体のグリーン関数 $G_K(E)$ は (8) によって厳密に得られるが、2 体のグリーン関数 $K(i\omega_\alpha)$ は閉じた形に

得られなかった。 $G_K(E)$ のずれぼけエネルギーは $\Sigma_K(E) = \Delta + iS(E)\Gamma$ と定数であるにもかかわらず、2体のグリーン関数を求めるのにはバーテックス補正が本質的に重要である事がわかった。これははしご近似の範囲ではバーテックス補正は不必要⁶⁾ という常識は高次の項まで考えると正しくないという一例となる。また $G_K(z)$ が z の実軸上に極を持たなければ $\sigma \neq 0$ という Bonch - Bruevich の予想⁷⁾ も疑問がわく。

ここでは局在性については明確な結論を得る事はできなかった。しかし(27)の結論は $V/\Gamma \ll 1$ の極限で Anderson の結論²⁾ が正しい事を示す。グリーン関数法はこの種の問題と取り扱うのにはあまり便利ではない。将来もっと明確な結論が得られる事を期待して筆を擱く。

最後に有益な討論をして下さった金沢秀夫教授、水野幸夫助教授、和田靖助教授に感謝します。

文 献

- 1) P. Lloyd: J. Phys. C (Solid St. Phys.) 2 (1969) 1717.
- 2) P. W. Anderson: Phys. Rev. 109 (1958) 1492.
- 3) P. W. Anderson: Comments on Solid St. Phys. 2 (1970) 193.
- 4) N. F. Mott: Phil. Mag. 17 (1968) 1259. 及びその中の引用文献.
- 5) 例えば H. Fukuyama, M. Saitoh, Y. Uemura and H. Shiba: J. Phys. Soc. Japan 28 (1970) 842.
- 6) A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. Ye. Dzyaloshinskii: Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Mechanics, 2nd ed. (Pergamon Press, Oxford, 1965).
- 7) V. L. Bonch-Bruevich: Phys. Letters 18 (1965) 260.

図 1.

$$\begin{aligned}
 \times \ell &\longleftrightarrow g_\ell \\
 \xrightarrow{\ell \quad n} &\longleftrightarrow V(\ell - n) \\
 \xrightarrow{\ell \quad n} &\longleftrightarrow J_X(\ell - n)
 \end{aligned}$$

を対応させる。

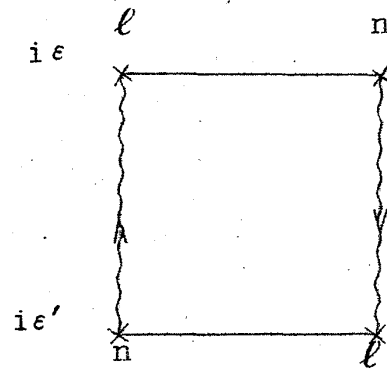


図 2.

