

周期系とランダム系の中間にはいくつかの興味ある系があると思われるが、概周期系の一部とも考えられる準結晶はどのような一般的性格を持っているだろうか。現在知られている幾つかの具体例を準結晶とよぶ事として、その特徴として (1) 構造に膨張収縮対称性がありコーンウェイの定理に代表される Long Range Order がある。 (2) スペクトルが Singular Continuous (カントール集合)。 (3) 固有関数が Critical (中絶減衰) であり Self Similar and Spiky Structure を持つ。等が考えられる。特徴 (2) (3) はフィボナッチ系⁽¹⁾ (1次元)、ペンローズ系⁽²⁾ (2次元) 等では知られているが、伝導性等の物性にどのような影響を与えるであろうか。伝導に関する基本的な性格を見るために一体グリーン関数の行列要素 $G_{l,l'}(E)$ (l, l' : サイト, E : エネルギー) とコンダクタンス $g(L, E)$ (L : システムサイズ) をフィボナッチ系で数値的に調べその結果に基づき幾つかの可能性に触れる。

§1. 強結合モデル・グリーン関数・伝達行列・コンダクタンス

次のハミルトニアンで書かれる一電子系を考える

$$H = \sum_{l=1}^N |l\rangle \varepsilon_l \langle l| + \sum_{l=1}^{N-1} (|l\rangle \times |l+1\rangle + |l+1\rangle \times |l\rangle) \quad (1.1)$$

但し、 ε_l はフィボナッチ列 $ABAAB \dots$ に対応して $\varepsilon_l = 1$ (A) または $\varepsilon_l = -1$ (B) である。エネルギー E を与えた時の齊次方程式 $(H - E)U(E) = 0$ の2つの独立解 $\{U_l^+(E); U_0^+ = 0, U_N^+ = 1\}$ (増大解) と $\{U_l^-(E); U_{N+1}^- = 0, U_N^- = 1\}$ (減衰解) を使うと固定境界条件でのグリーン関数 $G(E)$, $(H - E)G(E) = I$, ($E = E + i0_+$) は

$$G_{l,l'}(E) = C U_l^+(E) U_{l'}^-(E) \quad \text{for } l < l' \\ = C U_{l'}^+(E) U_l^-(E) \quad \text{for } l' < l \quad (1.2)$$

と構成される。C は適当な定数である。上式はグリーン関数の行列要素の $l-l'$ に関する減衰の様子は増大解の増大の様子及び減衰解の減衰の様子により決まる事を意味する。(高次元系については文献3を参照の事) $U^\pm(E)$ を求める齊次方程式は伝達行列を使った以下の式と同等である。

$$\Phi_{l+1}(E) \equiv \begin{pmatrix} U_{l+1}(E) \\ U_l(E) \end{pmatrix} = T_l(E) \Phi_l(E), \quad T_l(E) \equiv \begin{pmatrix} E - \varepsilon_l & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1 < l < N). \quad (1.3)$$

伝達行列の積 $T_{(n)}(E) \equiv T_{l+n-1}(E) \dots T_{l+1}(E) T_l(E)$ は $\Phi_{l+n}(E)$ と $\Phi_l(E)$ を結びつけるものでありその二つの固有値 $\lambda_{(n)}^+(E)$, $\lambda_{(n)}^-(E)$ ($|\lambda_{(n)}^+| \geq |\lambda_{(n)}^-|$, $\lambda_{(n)}^+ \lambda_{(n)}^- = \det T_{(n)} = 1$) のうち $|\lambda_{(n)}^+(E)|$ が n に関し指数関数的 (中絶) に増大する場合は $|U_{l+n}^+(E)|$ も同様であり $|G_{l,l'}(E)|$ ($n = |l-l'|$) は n に関し指数関数的 (中絶) に減衰する。又一次元の場合は (近似的にはあるが) コンダクタンス $g(n, E)$ 及びレジスタンス $r(n, E) = g(n, E)^{-1}$ を $T_{(n)}(E)$ と結びつけて計算出来るので上田氏の⁽⁴⁾ 習い以下の式も調べた

$$g(n, E) = \text{Tr} \{ 2 / ((T_{(n)} T_{(n)}^*) + (T_{(n)} T_{(n)}^*)^{-1} + 2) \}. \quad (1.4)$$

この量は $|\lambda_{(n)}^+(E)|^2$ に関係している事でここにも $|\lambda_{(n)}^+(E)|$ に類似の性格が表われる。

§2. 数値的な結果

図1に $N=13.5$ 万の場合の固有値の分布のヒストグラム (全体図) を示す。きれいな入れ子構造が見られこの構造は (数値計算が意味を持つ範囲で) ヒストグラムの中をこの10万分の1にし (図を拡大し) ても変わらない。フラクタル次元 D を適当な定義で計算すると、この範囲で $D=0.56 \pm 0.01$ であり、確かにスペクトルはカントール集合になっていると思われる。その限りではその測度は零である。従って、任意のエネルギー E は確率1でバンドギャップ上にある。

そこで $|\lambda_m(E)|$ の増大率 $A(E)$ ($|\lambda_m| \sim e^{A^n}$) を調べると図2のように図1に対応したものとなる。スペクトルの密集した "谷間" は、より詳細な内部構造があるため拡大して見なければならぬ。"谷間" を拡大すると又図2とほとんど同じ構造が表われる。このようなエネルギーに敏感な構造は (数値計算が意味を持つ範囲で) 10倍に拡大しても続く。 ΔE なるエネルギーギャップ上での A の局大値は $A(E) \cong (\Delta E/2)^{1/5}$, $\delta=1.5 \sim 2.0$ なる関係にあるようである。6桁 (10万倍に) 拡大すると A の値が 0.0005 以下のエネルギー領域が見えて来る。基底エネルギー近くのそのような領域の一例 $E=-2.097633$ について増大解の増大の平均的振舞 $\langle |\lambda_m| \rangle$ 及びレジスタンスの平均的振舞 $\langle r(m) \rangle$ ($\langle \rangle$ は13.5万の長さの系の長さ n の部分系についての平均) を $n=2$ から $n=2^{10}=1024$ 迄に渡り、 $\ln - \ln$ プロットで見たのが図3である。平均値にゆらぎがあるが全体としてパワー則に従っている。平均値のゆらぎは部分についての平均のとり方に依存する。事実このパワー則領域での分散はほとんど平均値に等しい。固有関数の持つスパイクな特徴により $|\lambda_m|$ も $r(m)$ もその値が1のオーダーからその平均値のオーダーに激しく規則的に変動している。

図1

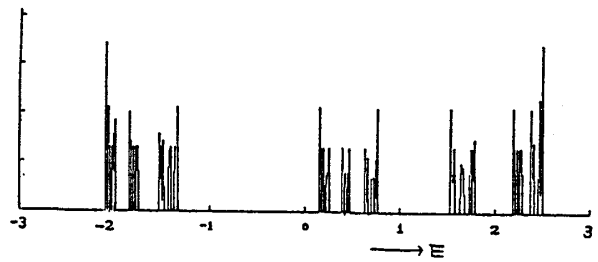


図2

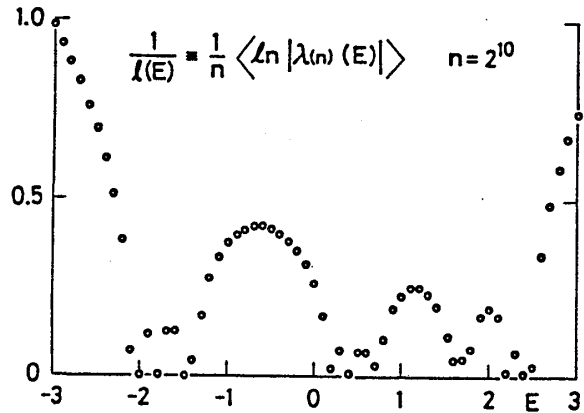
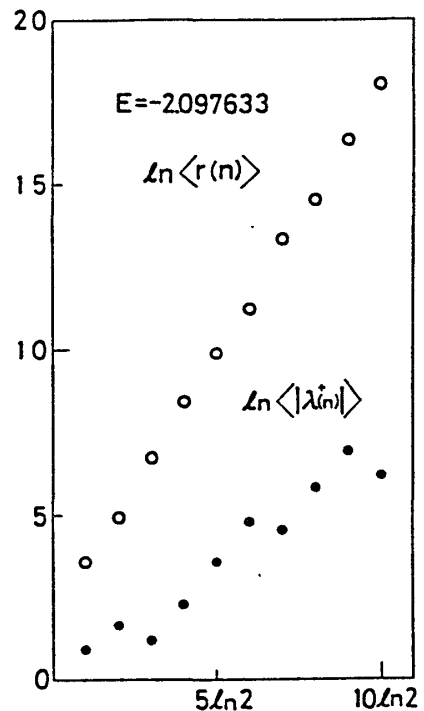


図3



事を示していると思われる。 $\langle |\lambda_m| \rangle$ $\langle g(m) \rangle$ に関してはおよそ図3と横軸に関して対称な図が得られる。とすると四つの量には一般に、 $A(E) \sim 1/m^*$ なるエネルギーについて調べてみると、 $m \sim m^*$ で中則から指針則へのクロスオーバーが見られる。

§3. まとめ・討論

フィボナッチ系のグリーン関数及びユングタンスは平均的には以下のようにある

$$\langle |G_{L,2m}(E)| \rangle \propto m^{-\alpha(E)} e^{-A(E)m} \quad (3.1)$$

$$\langle g(m, E) \rangle \propto m^{-\beta(E)} e^{-B(E)m} \quad (3.2)$$

但し、 $B(E) \cong A(E)$ であり、中則領域での分散はほとんど平均値に等しい。 $A(E)$ は既に図2に見た通りでありエネルギーに敏感である。一方 $\alpha(E)$, $\beta(E)$ は $\langle |\lambda_m(E)|^{-1} \rangle$, $\langle g(m, E) \rangle$ より決める。まだ作業は終わっていないがエネルギーに敏感なめらかに変化しているようである。エネルギーの値により $2\alpha, \beta > 1$ の場合と $2\alpha, \beta < 1$ の場合がありそうである中局在と中非局在、両方の固有関数がある事を示唆している。

$B(E) \cong A(E)$ が充分小さい場合平均的な意味で $g(m, E) \propto m^{-\beta(E)}$ であるが、これは $\beta = -1$ とするスケーリング理論にフィボナッチ系が乗らない事を示している。更に、有限温度での平均自由行程が $m_E = \sqrt{D\tau_E}$ (D : 拡散係数, τ_E : 非弾性散乱による電子の緩和時間) で与えられる事と $\tau_E \propto T^{-p}$ を認めると

$$\rho(T, E_F) \propto g(m_E(T), E_F) \propto D^{-\frac{p}{2}} T^{\frac{p\beta}{2}} e^{-BD\frac{1}{2}/T^{\frac{p}{2}}} \quad (3.3)$$

となり $\rho(T)$ が中則に従う温度領域が出現する事が期待される。低温でも $A(E) \cong 0$ なるエネルギーがフェルミエネルギーのすぐ上にある場合は $B(E_F)$ は思いの外効かないのではない。電子は非弾性散乱が起きるまでのあいだ系の部分、部分を次々と見ていくので(ゆらぎはあっても)中則が電気伝導率又は抵抗率に表われるのは自然に思われる。

以上の話は、準結晶の持つ一般的特徴(1)(2)(3)によると思われる一次元素のみに特有の事ではないように思われるが具体的にどのような方法で調べたら良いであろうか。

References

- 1) M. Kohmoto, L. P. Kadanoff and C. Tang, Phys. Rev. Lett. 50 1870 (1983).
O. Ostlund et al, Phys. Rev. Lett. 50 1873 (1983).
J. P. Lu, T. Odagaki and J. L. Birman, Phys. Rev. B 33 4809 (1986).
M. Fujita and K. Machida, Solid St. Commun. 59 61 (1986).
T. Ninomiya, J. Phys. Soc. Jpn. 55 3709 (1986). 等。
- 2) H. Tsunetzugu, et al J. Phys. Soc. Jpn. 55 1420 (1986).
M. Kohmoto and B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. 56 2740 (1986).
B. Sutherland, Phys. Rev. B 34 3904 (1986). 等。
- 3) 合田, 日本物理学会 1986年秋 27 P QB2. Prog. Theor. Phys. 74 958 (1985).
- 4) P. W. Anderson et al, Phys. Rev. B 22 3519 (1980).
Y. Imry, Europhys. Lett. 1 249 (1986).
上田 和夫, 本研究会講演及びプレプリント
- 5) E. Abraham et al, Phys. Rev. Lett. 42 673 (1979).
- 6) 例えば、長岡洋介 日本物理学会誌 40 494 (1985). を見よ。