

1次元アンダーソン局在系の動的応答 ——計算機実験と厳密解

東北大理 佐宗哲郎, 金昌一

§1. 序

Abrahamsらのスケーリング理論及びGorkovらに始まるダイヤグラム法による弱局在の微視的理論は, アンダーソン局在の理解に大きく寄与した. 後者においては, 電子-電子対及び電子-正孔対の動的励起ととも拡散過程の重要な役割を担っている. また, 弱局在系における電子間相互作用の効果も系の動的な構造が支配している. 従って, これらの理論との関連において, アンダーソン局在系の動的構造を計算機実験により直接調べることは大いに有益であろう. 特に1次元では, 新しいアルゴリズムにより非常に大きなサイズの系に対する計算が精度よく行なえ, ある場合には厳密解が得られるので, 明確な結論が得やすい. そこで我々は, 1次元無秩序系の動的電気伝導度 $\sigma(\omega)$ 及び局所二準位相関関数 $g_2(\varepsilon, \varepsilon+\omega) \equiv \langle \rho(\varepsilon, x) \rho(\varepsilon+\omega, x) \rangle$ ($\rho(\varepsilon, x)$ は局所状態密度) の計算機実験を行なった. 方法はMackinnonの方法を動的な場合に拡張したものを用いる. この方法は, 静的な電気伝導度については1億サイトの系までも計算できる強力なものである.

§2. 動的電気伝導度 $\sigma(\omega)$ の計算機実験

N サイトの1次元アンダーソン・モデル(最隣接ホッピング積分 V , サイト・エネルギー $\{\varepsilon_n\} : -W/2 \leq \varepsilon_n \leq W/2$) に対して久保公式により動的電気伝導度を計算する:

$$\text{Re } \sigma^{(\omega)}(\omega) = \frac{1}{\omega} \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F+\omega} \text{Re } \sigma_E^{(\omega)}(\omega), \text{Re } \sigma_E^{(\omega)}(\omega) = \frac{2\hbar e^2}{\pi N a} \text{Tr} \{ \varepsilon \text{Im } G^{(\omega)} \varepsilon \text{Im } G^{(\omega)} \}, \quad (1)$$

ここで $\varepsilon = i[H, x]/\hbar$, $x = \sum_{n=1}^N x_n |u\rangle \langle u|$ は位置変算子, $x_n = \eta a$, a は格子定数, $G^{(\omega)} = G^{(\omega)}(E+\omega+i\gamma)$, $G^{(\omega)} = G^{(\omega)}(E+i\gamma)$, $G^{(\omega)}(z) = (z - H^{(\omega)})^{-1}$ である. 有限系を扱うために小さなエネルギーの虚部 γ を導入しなければならない. $\sigma_E^{(\omega)}$ は座標表示で

$$\sigma_E^{(\omega)}(\omega) = \frac{e^2}{2\pi\hbar N a} \sum_{n,m=1}^N (x_n - x_m)^2 \{ \omega^2 G_{\omega nm}^{(\omega)} G_{nm}^{(\omega)} - (\omega + 2i\gamma)^2 G_{\omega nm}^{(\omega)} G_{nm}^{(\omega)*} \} \quad (2)$$

と書ける. Mackinnonの方法を動的な場合に拡張して, $G^{(\omega)}(z)$ の漸化式を用いて $\sigma_E^{(\omega)}(\omega)$ の漸化式を求め, $N=1$ から出発して逐次的に非常に大きな系まで計算することができた. ここでは E をバンドの中心にとり, $N=10^6$, 20 サンプルについて計算した. なお, $\sigma_E^{(\omega)}(\omega)$ の E 依存性は小さいので $\sigma^{(\omega)}(\omega) \approx \sigma_E^{(\omega)}(\omega)$ である. $W/V=1$ 及び5の場合の結果を図1(a), (b)に示した. ϕ は平均値と標準偏差を示す. 横軸はボルン近似での電子の緩和時間 τ ($\hbar/\tau = W^2/12V$) で, 縦軸はDrudeの値 $\sigma_0 = ne^2\tau/m$ でスケールしてある. ただし m はフェルミ・エネルギーでの速度と運動量の比とする. 無秩序性の弱い時 ($\varepsilon_F \tau \gg 1$, ε_F はフェルミ・エネルギー) に漸近的に正しいBerezinskii²⁾の解(図1実線, 点線はDrude理論)と比較して, $W/V=1$ ($\varepsilon_F \tau = 2.4$) の場合は, ω の広い範囲でよく一致している. $\omega \rightarrow 0$ 付近ではBerezinskiiの解は我々の計算よりやや小さい. $W/V=5$

の時にも, $\varepsilon_F \tau \sim 1$ であるにもかかわらず, よく一致している. Berezinskii の解は, 個々の散乱体による散乱を最低次のボルン近似で扱っている. その後 Gogolin³⁾ は, 個々の散乱体による散乱が任意の強さ (しかし $\varepsilon_F \tau \gg 1$) の場合に理論を拡張した. それによると, $W/V = 5$ ではピーク位置が 0.1 といふ右へ, 高さが数%低くなる. ところがこの場合も我々の計算にくらべてピークが小さいことになる. 最近 Gogolin⁴⁾ は, 任意の $\varepsilon_F \tau$ の値に対して使える拡張を行なったが, $\sigma(\omega)$ の具体的な計算はなされていない. なお, 2次元で成功しているといわれる Vollhardt と Wölfle の理論を1次元で用いると, 定量的には良くない (図1(a)鎖線). これは, 1次元では弱局在理論が $1/\varepsilon_F \tau$ の展開とならないためである.

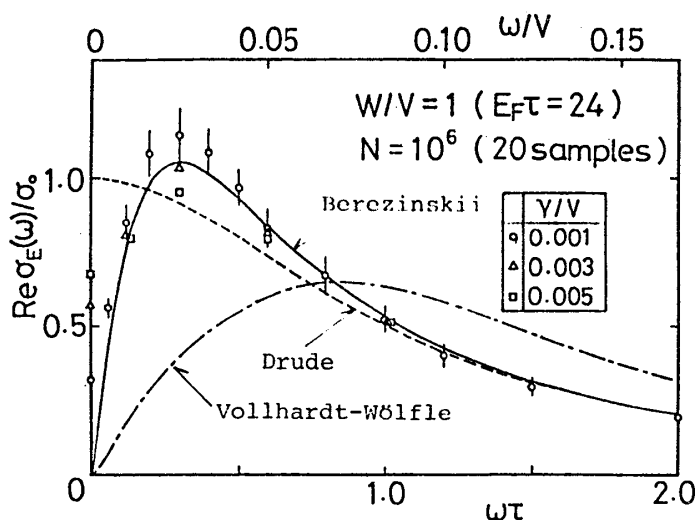


図1(a)

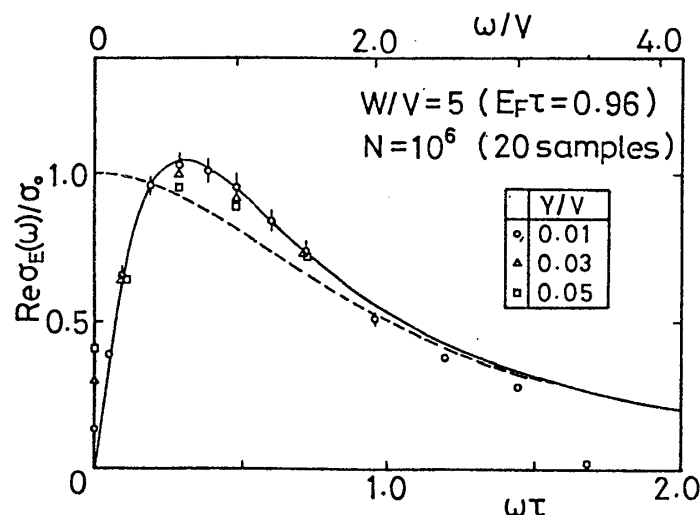


図1(b)

§3. 局所二準位相関関数の計算機実験と厳密解.

前節と同様にして, まず座標表示で N サイト系に対して

$$g_2(\varepsilon, \varepsilon + \omega) = \frac{1}{\pi^2 N} \sum_{n=1}^N \text{Im} G_{nn}^{(\omega)} \text{Im} G_{nn}^{(\omega)} = \frac{1}{2\pi^2 N} \text{Re} \sum_{n=1}^N \{ G_{nn}^{(\omega)} G_{nn}^{(\omega)*} - G_{nn}^{(\omega)} G_{nn}^{(\omega)} \} \quad (3)$$

と書き, $g_2(\omega)$ の漸化式をつくる. $N = 10^6$, 20 サンプルについて計算した. ε はバンドの中心とし, $g_2(\omega) \equiv g_2(0, \omega)$ についての結果を図2に示す. $\omega \rightarrow 0$ で増大は, ω と g_2 の定義に含まれている $\omega = 0$ のデルタ関数が有限エネルギー座卸 γ によって広がったためである. γ を小さくすると, この g_2 の増大は消失する傾向を示す (図の $\blacktriangle$, $\blacksquare$, $\blacktriangledown$ 印). なお $V = 1$ としていた. W が大きい時は $K(\omega) \equiv g_2(\omega) / \langle \rho(0) \rangle \langle \rho(\omega) \rangle$ ($\rho(\omega)$ は状態密度の平均値) は1より小さく, Motz の言う level repulsion が起きている. すなわち, 空間的にもエネルギー的にも近い局在状態同士の直交しなげなければならないために互いに反発し合い, g_2 が減少する. W が小さくなると $K(\omega)$ は1に近づく. 我々は Berezinskii の方法を用いて, $\varepsilon_F \tau \gg 1$ の場合に対して $g_2(\omega)$ を求めた. これによると, $W =$

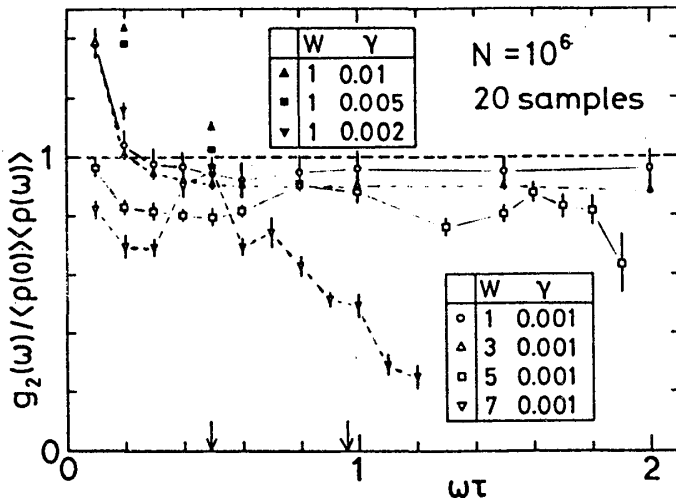


図3.

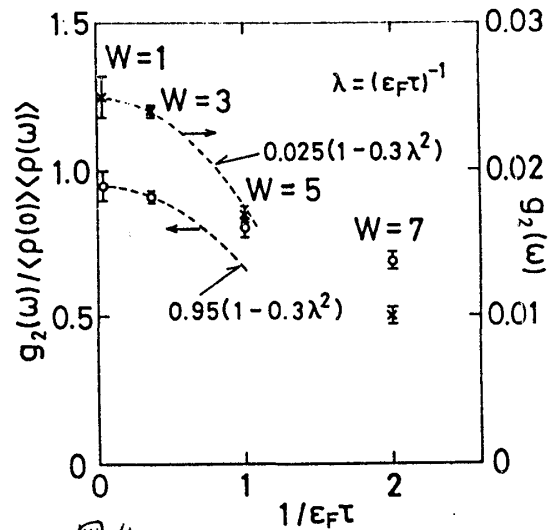


図4.

0 の時 g 値に対する補正項はすべて打ち消し合っ $g_2(\omega)/\rho_0^2 = 1$ (ρ_0 は $\omega = 0$ の時 g 状態密度) となる. (糧各班研究会報告書 (「物性研究」 40 (1983) No.1) で, この補正項を $(E_F \tau)^{-1}$ の次数と書いたのは誤りで, $(E_F \tau)^0$ である) $g_2(\omega)$ の $\omega \rightarrow 0$ で g 増大の部分を除いた平らな部分を $(E_F \tau)^{-1}$ に対してプロットすると, 図3に示したように, およそ $g_2(\omega)/\rho_0^2 = 1 - 0.3(E_F \tau)^{-2}$ となる. $g_2(\omega)/\langle \rho(0) \rangle \langle \rho(\omega) \rangle$ が $(E_F \tau)^{-1} \rightarrow 0$ で1から少しずれている点には検討が必要である.

電子間の γ - ρ 相互作用 $v(r)$ の弱い時に, その最低次の準粒子の状態密度の変化 $\delta \rho(\omega)$ ($\omega = \varepsilon - E_F$) を考える. Tight-binding model とし, $v(r_{ij}) = v_n (i=j)$ または $v_{ij} (i \neq j)$ とすると,

$$\delta \rho(\omega) = v_0 g_2(\omega) + \frac{1}{2\pi^2 N} \operatorname{Re} \sum_{ij} v_{ij} [2(G_{\omega ii} G_{ij}^* - G_{\omega ii} G_{jj}) - (G_{\omega ij} G_{ji}^* - G_{\omega ij} G_{ji})]$$

と書ける. 2次元弱局在理論では $g_2(\omega)$ 及びその項が $\omega \rightarrow 0$ で符号反対で異常に増大し, 状態密度に異常を生じさせる. これは本来にあるのだろうか, 計算機実験によって確かめることに興味がある. 1次元では, 上に見たように g_2 の部分には ($\gamma \rightarrow 0$ では) 異常はないと思われる. $\delta \rho(\omega)$ の2, 3項について Mackinnon または Berezinskii の方法で調べることもできる. (しかし1次元では相互作用を摂動で扱うことは適当でない) 最後に, Volthardt と Wölfle の理論は, 1次元では $g_2(\omega) \rightarrow 3$ ($\omega \rightarrow 0$) と与え, 定性的にも正しくなる.

- 1) A. MacKinnon : J. Phys. C 13 (1980) L1031.
- 2) V. L. Berezinskii : Sov. Phys. JETP 38 (1974) 620.
- 3) A. A. Gogolin : Phys. Reports 86 (1982) 1.
- 4) A. A. Gogolin : Solid State Comm. 45 (1983) 361.
- 5) F. J. Ohkawa : "Anderson Localization" (Springer, 1982) p. 113.