

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 $\{\epsilon_n\}$; $-W/2 \leq \epsilon_n \leq W/2$) 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。 $\text{Re} \sigma(\omega)$ は久保の公式から, N サイト系に対して

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{1}{\omega} \int_{E_F - \omega}^{E_F} dE \text{Re} \sigma_E^{(N)}(\omega), \quad \text{Re} \sigma_E^{(N)}(\omega) = \frac{2e^2 \hbar}{\pi N a} \text{Tr} [v \text{Im} G^{(N)}(E + \omega + i\tau) v \text{Im} G^{(N)}(E + i\tau)]$$

ここで $v = \frac{1}{\hbar} [H, x]$ 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, $G^{(N)}(z) = (z - H^{(N)})^{-1}$ 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 τ 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。

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

ここで $G_{\omega}^{(N)} = G^{(N)}(E + \omega + i\tau)$, $G^{(N)} = G^{(N)}(E + i\tau)$ である。MacKinnon の方法を動的な場合に拡張して, $G^{(N)}(z)$ 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 $\sigma(\omega) \simeq \sigma_E^{(N)}(\omega)$ ($E = E_F$) 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 $\omega\tau_0$ (Born近似で緩和時間; $\tau_0 = 12\hbar V/W^2$) であり, 縦軸は $\sigma = (e^2/\pi\hbar) 2\nu_F \tau_0$ 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. Grogolin and V. I. Melnikov: Phys. Stat. sol. (b) 88 (1978) 377

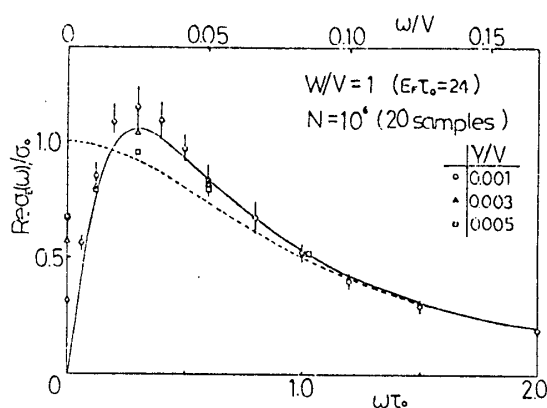


図 1

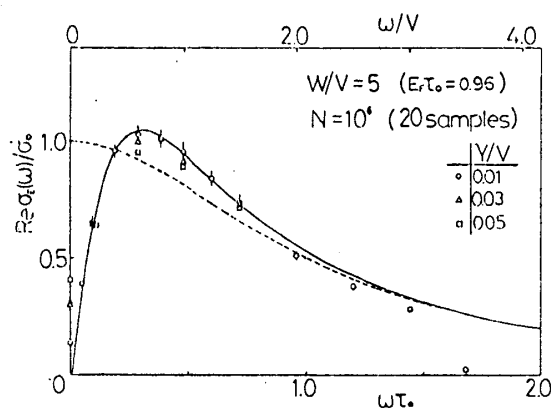


図 2