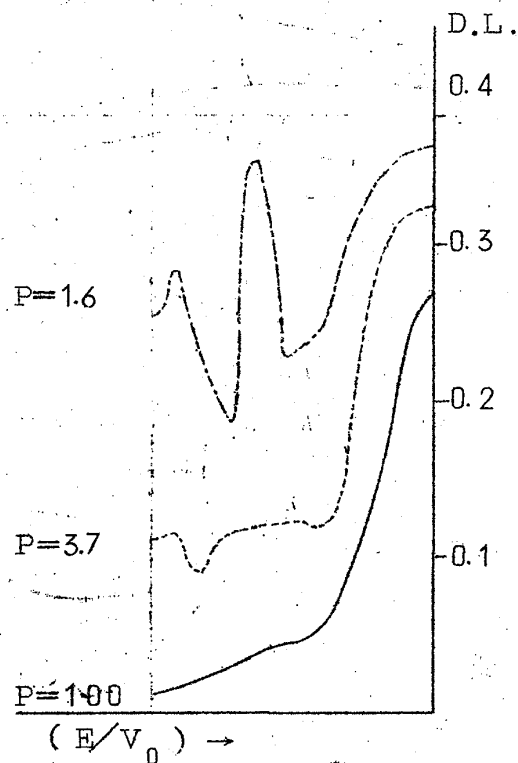


二次元不規則系に於ける波動函数の局在性

京大基研 松田博嗣

早大理工 宮田隆

先に我々は不純物半導体における波動函数の局在性を2次元 Matsubara-Toyozawa model に従って調べた(松田, 宮田, 石井: 物理学会 1968年4月)。この計算機実験により得られた波動函数に関する特徴的な結果は次の様であった。すなわち, 高いエネルギー状態の波動函数は濃度によらず, たまたま最も接近した2つの原子に局在する。中間のエネルギー状態では他の原子から孤立した1原子に局在するが, その局在の程度は濃度の増加とともに減少する。低いエネルギー状態では, 波動函数の様子は濃度によりかなり異なり, 低濃度では最も接近した2原子に局在するが, 高濃度になると波動函数は非常により非局在性を示す。図1にその様子を示した。Pは濃度を示すパラメーターである(DL; Degree of localization)。



図の1

ところで高濃度型不純物半導体に於ては, ある温度領域で Hall 係数は peak を作り, その peak のところで比抵抗が大きく変化する特徴を示すが, host の影響を無視した Matsubara-Toyozawa model ではこの変化を説明することが困難であり, 二帯 model が提唱された。今回はこの二帯 model に従って波動函数の局在性を調べた。

Model Hamiltonian として

$$H = \sum_n \epsilon_n a_n^* a_n + \sum_n \sum_{n \neq m} V_{nm} a_n^* a_m$$

$$\epsilon_n = \begin{cases} \epsilon_H & ; (n \text{ が host の時}) \\ \epsilon_I & ; (n \text{ が impurity の時}) \end{cases} \quad (1)$$

を採用する。ここに a_n^* , a_n は n site に電子を生成, 消滅させる演算子である。実際の計算にあたって我々は model を簡単化して, 相互作用に関して最近接近似を取り, site 依存性をおとした ($V_{nm} = V = 1$)。さらに 2次元格子点に 10×10 個の host をおき, boundary は cyclic にしておく。そして 10 個の site を random に抽出して impurity におきかえた。

Impurity のエネルギー ϵ_I を色々に変化させたときの state density (SD) と degree of localization (DL) のヒストグラムを図 2 ~ 5 に示した。Degree of localization は前回と同様に

$$\mathcal{L}_\mu = \sum_n \left(c_{n\mu}^2 - \frac{1}{N} \right)^2 \quad (2)$$

と定義する。ここに $\{c_{n\mu}\}$ は (1) を対角形にする unitary matrix で N は site の数である。SD は 1 に規格化されている。

図 2 と図 3 は host と impurity atom のエネルギー差が比較的大きな場合であるが, この様な場合は host と impurity の部分が良く分離されており, impurity の部分の波動函数の性質は Matsubara-Toyozawa model による低濃度に於けるそれとほぼ等しい。図 4 と図 5 は host と impurity atom のエネルギー差が小さな case である。このときはもはや host と impurity の区別がつきにくくなり, impurity の band は host の band にうづまって, 波動函数はほとんどの状態について非局在性を示している。

二次元不規則系に於ける波動函数の局在性

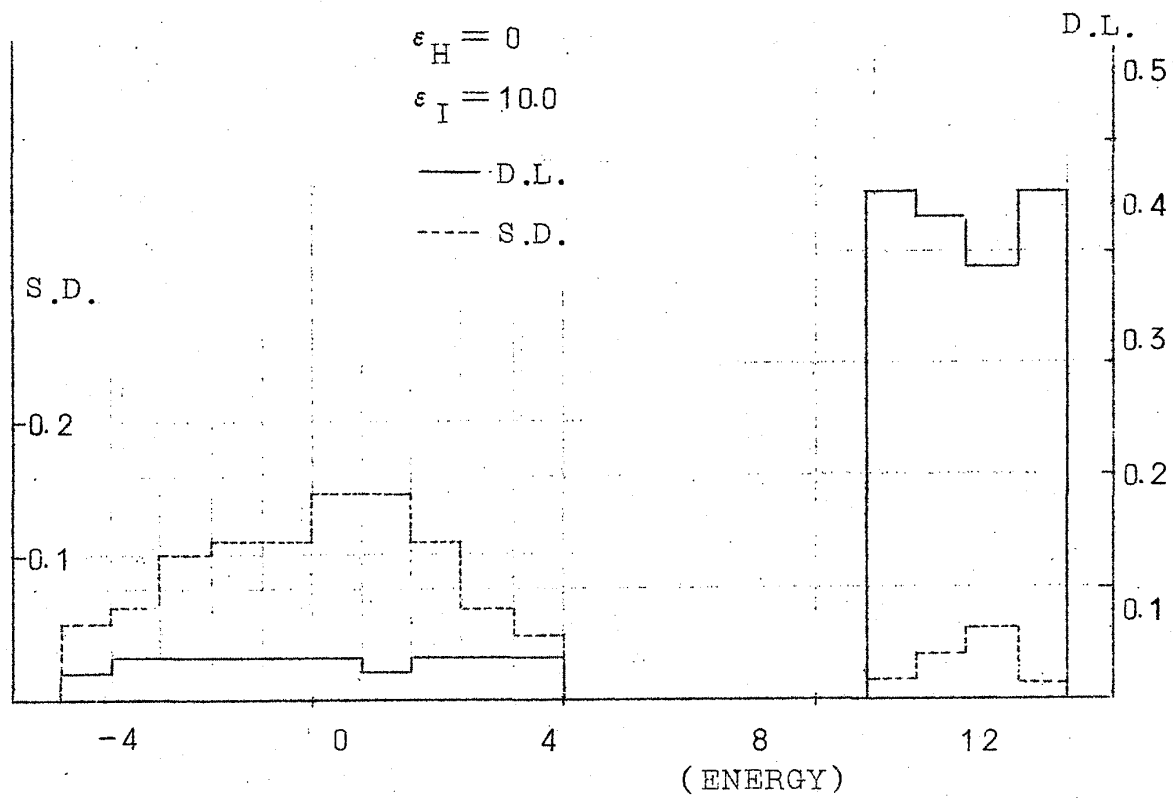


図 の 2

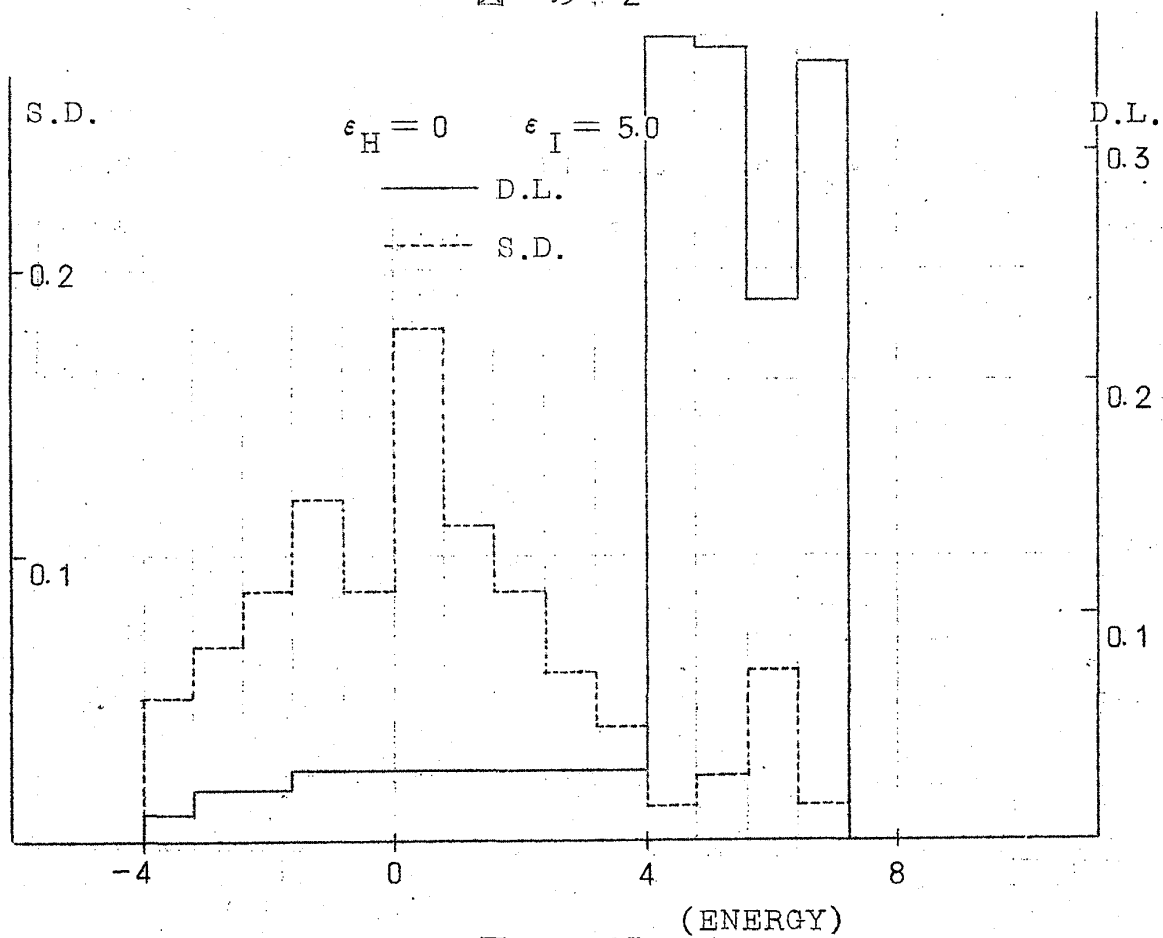


図 の 3

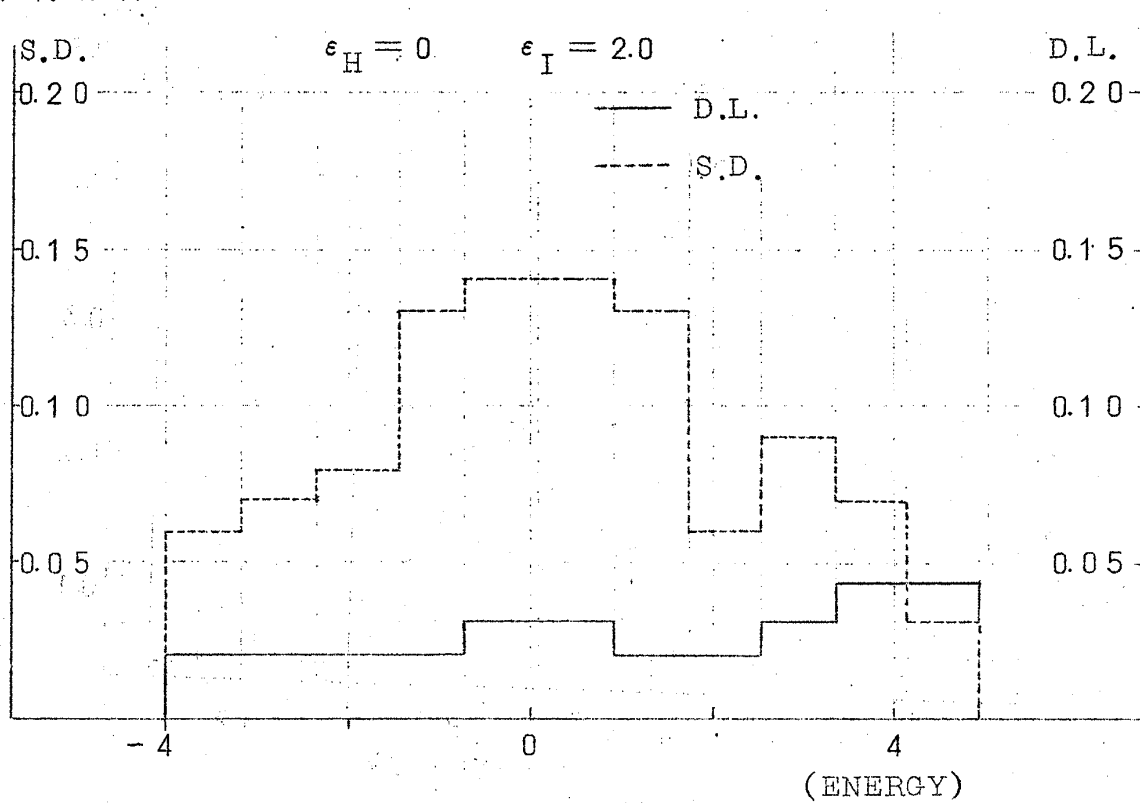


図 4

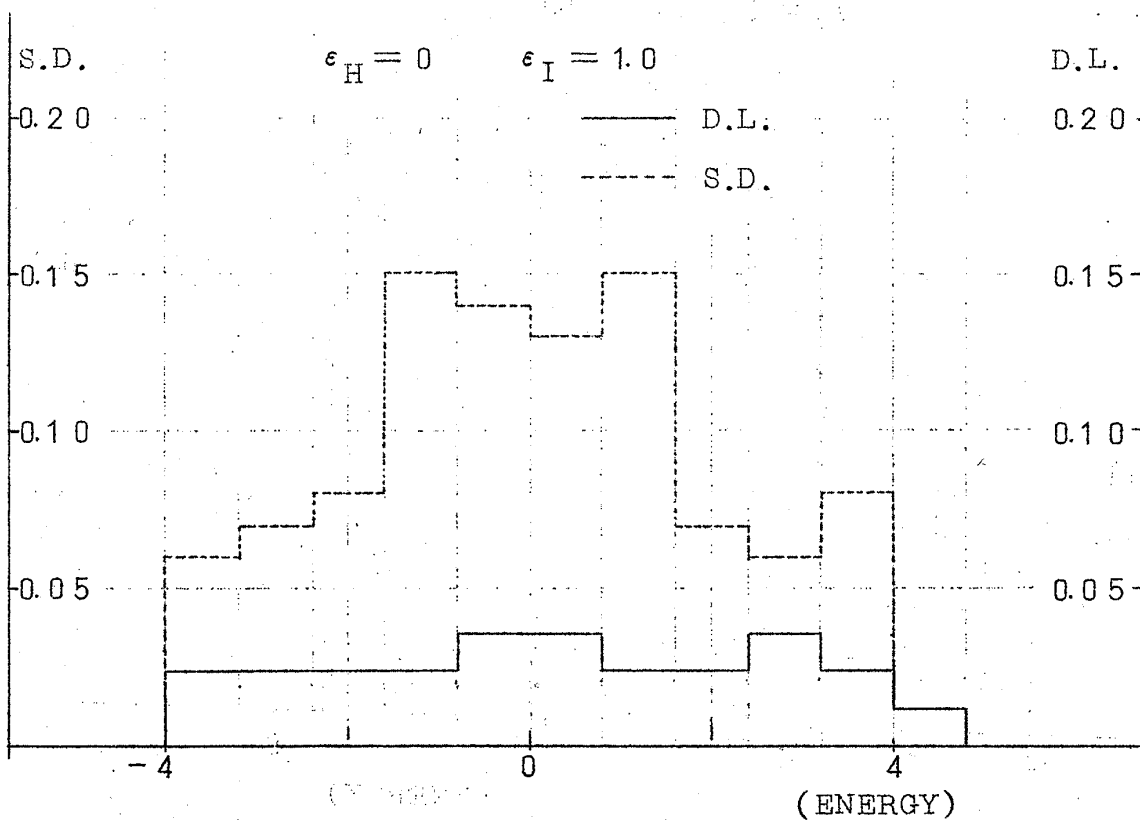


図 5

Host 側では ϵ_I の減少による D.L. の変化はほとんど認められないが, impurity band ではその大きさが小さくなっていくのがみられる。これは ϵ_I の減少とともに impurity では含まれた host の振巾が次第に大きくなり, 逆に impurity のそれを減少させていることと関係している。このことは host と impurity atom のエネルギー差によっては, かなり離れた impurity の間にも host atom を媒介にして波動函数がひろがり得ることにもなる。