

アンダーソン局在の計算機実験

東北大・理 佐宗 哲郎

§1. 序

典型的な価数振動物質であるSmB₆においては、比熱、電気抵抗、トンネル効果、NMR、光吸収等の実験¹⁾から、フェルミ面上に100~200 Kのギャップが存在すると指摘されている。その起源として、槽谷²⁾により、狭い4fバンド内における4f正孔のアモルファス・ウイグナー結晶であるとする見方が提出されている。これは、系の無秩序性と電子間の強いクーロン相互作用がからまった問題であり、理論的には難しい問題ではない。この稿では、電子間相互作用が無秩序性に較べて弱い場合について、最近計算機実験によって明らかになっているいくつかの結果について述べる。

§2. 1次元アンダーソン局在系の動的応答の計算機実験と厳密解.

Abrahams ら³⁾のスケーリング理論及びGorkovら⁴⁾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その弛散過程が重要な役割を担っている。また局在系における電子間相互作用の効果も系の動的構造が支配している。従って、この理論の妥当性を見るには、アンダーソン局在系の動的構造を計算機実験によって直接調べることに有益である。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の計算の精度よく行なえ、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=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。前者については本報告書、金昌一の稿を参照されたい。以下では後者について述べる。方法は前者と同様で、Mackinnon⁵⁾の方法を動的な場合に拡張したものをを用いる。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。モデルはアンダーソン・ハミルトニアン

$$H^{(N)} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i=1}^{N-1} V (|i\rangle \langle i+1| + |i+1\rangle \langle i|), \quad -W/2 \leq \varepsilon_i \leq W/2$$

とし、 N サイトの系に対する g_2 をサイト表示で

$$g_2^{(N)}(\varepsilon, \varepsilon+\omega) = \frac{1}{\pi^2 N} \sum_{i=1}^N \text{Im} G_{ii}^{(N)}(\varepsilon+i\gamma) \text{Im} G_{ii}^{(N)}(\varepsilon+\omega+i\gamma)$$

と書き、グリーン関数 $G^{(N)}(\varepsilon) = (\varepsilon - H^{(N)})^{-1}$ についての漸化式を用いて $g_2^{(N)}$ の漸化式を導く。これ $N=1$ から出発して逐次 $N=10^4$ まで計算した。 $V=1$, $\varepsilon=0$, $W=1, 3, 5, 7$ (各々 $(\varepsilon, \omega) = (0.0417, 0.375, 1.04, 2.04)$; γ はホルン近似での緩和時間

$1/\epsilon = W^2/12V$, $\epsilon_F = 2$ とした) についての結果を図に示す. サンプル数は20個, 中点は平均値と標準偏差を示す. 縦軸は状態密度の平均値の積 $\langle \rho(0) \rangle \cdot \langle \rho(W) \rangle$ でスケールしてある. $\langle \rho \rangle$ の標準偏差は2%以下である. $\omega \rightarrow 0$ の g_2 の増大は, ϕ と ϕ_2 の定義に含まれている $\omega = 0$ のデルタ関数が有限のエネルギー一帯部 γ に広がったためである. γ を小さくすると, ϕ_2 の増大は消失する傾向を示す (図の $\Delta, \blacksquare, \blacktriangledown$ 印). W が大きい

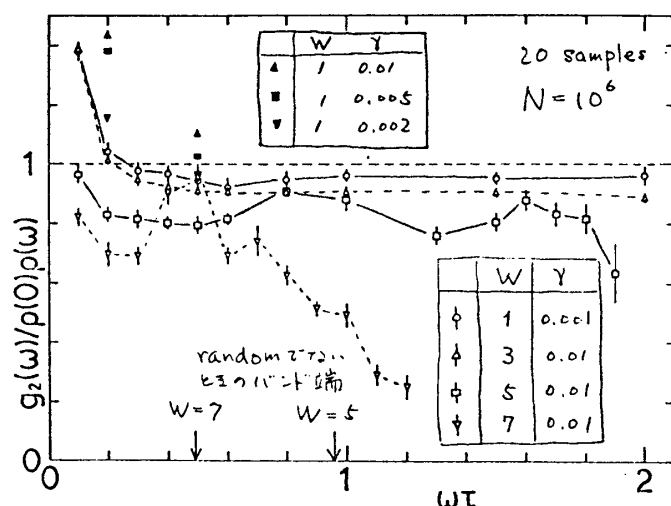


図 1.

時は $g_2(\omega)/\langle \rho(0) \rangle \langle \rho(W) \rangle < 1$ であり, Mott の言う level repulsion があっている. 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は直交し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 $g_2(\omega)/\langle \rho(0) \rangle \langle \rho(W) \rangle$ は1に近づく. 我々は最近 Berezinskii⁶⁾ の方法を用いて, $\epsilon_F \tau \gg 1$ の場合に対して g_2 の厳密解を得た. これによると, $(\epsilon_F \tau)^{-1}$ の次数の補正項はすべて打ち消し合っており, $g_2(\omega)/\rho_0^2 = 1 + O((\epsilon_F \tau)^{-2})$ となる (ρ_0 は $W=0$ の時の状態密度). $g_2(\omega)$ の $\omega \rightarrow 0$ の増大の部分を除いた, 平らな部分の値を $(\epsilon_F \tau)^{-1}$ に対してプロットすると, $(\epsilon_F \tau)^{-2}$ の依存性と矛盾しない.

電子間のクーロン相互作用 $v(r)$ の弱い時に, その最低次で, 準粒子の状態密度の変化 $\delta \rho(\omega)$ ($\omega = \epsilon - \epsilon_F$) を考える. Tight-binding model を採り, $v(r_{ij}) = v_0(i-j)$ または $v_{ij}(i+j)$ とすると,

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

と書ける. ただし $G_{\omega} \equiv G(\epsilon_F + \omega + i0^+)$, $G \equiv G(\epsilon_F + i0^+)$ と書いた. 2次元弱局在理論では $g_2(\omega)$ 及び ϕ 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. これは本当にあっているかどうか, 計算機実験によって確かめることは興味がある. 1次元では上に見たように ϕ の部分には ($\gamma \rightarrow 0$ では) 異常はないと思われる. $\delta \rho(\omega)$ の第2, 3項についても同じ方法で調べることができよう. ただし1次元では, 相互作用を摂動として扱うことは適当でない (本報告書, 福山の稿参照).

§3. Electron Glass における Coulomb Gap.

強く局在した系に対するクーロン相互作用の効果を調べるためのモデルとして最近いくつかの興味ある理論及び計算機実験が発表された Electron glass における Coulomb gap について簡単に紹介する. 例として, 低濃度の補償したn型半導体のドナー電子を考える.

電子は平均ドナー間隔に較べて強く局在しているとして、異なるドナー間での波動関数の重なりはないとすると、系全体のエネルギーは

$$E = \sum_i \varphi_i n_i + \sum_{ij} v_{ij} n_i n_j$$

と書ける。ここで n_i はドナー i の占拠数、 φ_i はドナー電子間の相互作用 v_{ij} を考えない時の (補償のためランダムな) サイト・エネルギーである。基底状態では空いている (つまっている) サイトに電子を1つ付け加える (取り去る) エネルギーを $E_i = \varphi_i + \sum_{j \neq i} v_{ij} n_j$ とすると、化学ポテン

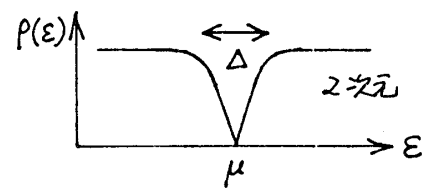
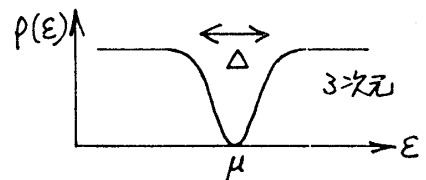


図2.

シャル μ に対して $E_i > \mu$ なら $n_i = 0$, $E_i < \mu$ なら $n_i = 1$ となっている。また j サイト ($E_j < \mu$) から i サイト ($E_i > \mu$) に電子を移す対励起エネルギー $\Delta_{ij} = E_i - E_j - v_{ij}$ (第3項 $-v_{ij}$ は電子-正孔引力によるエキシチック効果を表す) は、基底状態では正でなければならない。同様に複数対励起エネルギーもすべて正でなくてはならない。近似的に対励起に関する安定性のみ考慮すると、フェルミ・エネルギー近くエネルギー ε 内での電子の平均間隔は、一粒子励起のエネルギー E_i に対する状態密度を $\rho(\varepsilon)$ として、 $\rho(\varepsilon) \cdot R^d \cdot \varepsilon \sim 1$ より、 $R \sim (\rho \varepsilon)^{-1/d}$ となる (d は次元)、 $\Delta_{ij} > 0$ となるためには $\varepsilon > e^2/R$ が必要である。このことから $|\varepsilon| < \Delta \equiv (\rho_0 e^{2d})^{1/(d-1)}$ で $\rho(\varepsilon) < |\varepsilon|^{d-1}/e^{2d}$ となり、 $d = 2, 3$ 次元でソフト・ギャップが生ずる (図2)。Efros⁷⁾ は $\rho(\varepsilon)$ を決める近似的な自己無撞着方程式 $\rho(\varepsilon) = \rho_0 \exp[-A_d \int_0^\infty d\varepsilon' \rho(\varepsilon') / (\varepsilon + \varepsilon')^d]$ を導き、これを解いて同様の結論を得た。この結果は計算機実験によって確かめられた⁸⁾。このフーロン・ギャップは、フーロンの長距離力のために生じたもので、しゃへいフーロン・ポテンシャルに対してはギャップは消失する⁹⁾。実際には、付け加えた電子のまわりの電子配置の緩和が重要であり (ポーラロン効果)、ギャップを狭める⁹⁾。このモデルでは、フーロン相互作用の余り強くない時、対励起エネルギーにはギャップがない (対励起間の双極子相互作用により弱い異常は生ずる⁷⁾)。Sb₂Bi₂ で生じているギャップのモデルとしては、相互作用の強い場合を調べることに興味深いだろう。

(参考文献)

- 1) S. von Molnar, et al.: Proc. Int. Conf. on "Valence Instabilities" (Zürich, 1982)
- 2) T. Kasuya, et al.: J. Physique 40 (1979) C5-308 p. 389.
- 3) E. Abrahams, et al.: Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 673.
- 4) L. P. Gor'kov, et al.: JETP Lett. 30 (1979) 228.
- 5) A. MacKinnon: J. Phys. C 13 (1980) L1031.
- 6) V. L. Berezinskii: Sov. Phys. JETP 38 (1974) 620.
- 7) A. L. Efros, et al.: J. Phys. C 9 (1976) 2021; Sov. Phys. JETP 51 (1980) 199.
- 8) A. L. Efros, et al.: J. Phys. C 12 (1979) 1023, 1869.
- 9) J. H. Davies, et al.: Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 758.