

# 電子の局在性に関する数値解析 I\*

—対角不規則系における電子局在—

徳 永 旻<sup>1)</sup>

Akira TOKUNAGA

## Analysis of Numerical Results for Electron Localization I

—System with Diagonal Disorder—

A one-electron Hamiltonian in site-diagonal disordered system for two-dimensional square lattices composed of  $50 \times 50$  sites with nearest neighbour constant interactions is solved numerically. The squared amplitudes of a wavefunction corresponding to one of the eigenstates near the band centre are visually demonstrated. We can apparently observe that an Anderson localization takes place in the system with  $6.5 \leq \Gamma \leq 7.0$ , where  $\Gamma$  is the degree of diagonal randomness.

### §1. Introduction

固体物性に関する本格的な研究は、量子論の建設期とほぼ時を同じくして始まったとされている、長い間、主として前世紀に考察された結晶に関する対称群の操作の枠内から離れられずにいたといえよう。現実の物質は、一語を固体に限っても—その原子組成の不規則性、あるいは、完全結晶からのずれといった幾何学的不規則性をまぬがれない。この microscopic な不規則性を有する系での素励起が、macroscopic な物質系にどのように現われるかということに関心が集まったのは当然のことであるが、これらの研究がさかんになったのは比較的最近のことである。

われわれは、P.M. Anderson<sup>1)</sup> が最初にとりあげた、混晶型不規則系の1電子波動関数の局在性に着目する。この問題は十分一般性を持つと考えられ、現在注目されている。何故ならば、不純物質中の電子伝導に限らず、不規則系の問題として取り上げられる対象の多くは、構造的に同型であることが予想されるからであり、また、電子を独立粒子とみなせる限りにおいては、多電子問題に対する結果の本質的な変更はないと考えられるからである。

不規則系の問題の取扱いの困難さは、完全結晶が Bloch の定理により、全域の問題を単一セル内の量子論に帰することができるのに対して、原理的には、無限の拡がりを持つポテンシャルについての Schrödinger 方程式の解を問題とせねばならぬところにある。このような系では単純な模型も設定しにくく、多体問題的な近似法もまた、十分保証されているとはいえない。われわれは、有限であるが十分大きな系としては  $50 \times 50$  の正方形格子についての厳密解を得、電子局在に関する一連の解析を行っている。局在の程度を示す物理量を導入し、これに基づいた定量的な分析は、既に他に発表した。<sup>2),3)</sup> 本論文では、これらの分析の素資料ともいえるべき、より視覚的、直接的な電子の各格子点における存在確率についての計算結果のうち、国際的にも、国内的にも未発表のものを合せて、ここに集録する。

本論文の I (対角不規則系) に関する限りでは、同目的の Yoshino-Okazaki<sup>4)</sup> の先行する論文が

\*昭和54年1月23日原稿受理

1) 大阪産業大学教養部

存在する。本論文のⅡ、ⅢおよびⅣ（不規則系の一般の場合）の新しく提出されたデータに基づいた、より詳細な議論は十分今後の問題となり得るだろう。

## §2. Hamiltonian

ここでは、強結合 Hamiltonian

$$H = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + V \sum_{\langle i, j \rangle} a_i^\dagger a_j \quad (1)$$

で表わされる不規則系を考える。ここでは、 $a_i^\dagger (a_i)$  は  $i$  番目の原子の場所に電子を生成（消滅）させる演算子で、 $\{i\}$  は規則的な正方格子を組んでいるとする。（必要があれば、 $i = (x, y)$  と分解することにする。）(1)式では、対角要素  $\epsilon_i$  のみが乱雑に分布し、非対角要素  $V$  は最隣接原子間  $\langle i, j \rangle$  のみ 0 でない定数ととってある。この場合を一般に対角不規則系とよぶ。

Anderson の模型では、 $\{\epsilon_i\}$  の分布は互いに独立し、それぞれ、

$$|\epsilon_i| \leq \frac{\Gamma}{2} \quad (2)$$

の間に箱型に分布している。われわれも、これに従い、 $\{\epsilon_i\}$  に関して一様乱数をあてはめた、 $\Gamma$  は対角不規則性の程度を表わす量であり、Anderson によれば、 $\Gamma/V$  がある臨界値  $\Gamma_c/V$  よりも大となれば電子の全ての状態が局在することが予言されている。

このことに関する定量的確証を得るために、 $X$ -方向には周期的境界条件、 $Y$ -方向には剛体壁条件を設定した2500次元正方格子について、波動関数を解き、固有ベクトルの2乗  $|a_{xy}|^2$  の値を  $0 \leq \Gamma/V \leq 20$  の範囲の各場合について求めた。計算は大阪市大計算機センター F A C O M-230-60、京大大型計算センター M-190 および名大プラズマ研究所 M-190 を使用した。大型行列の計算法は Lanczos 法によったが、その詳細は論文Ⅳの appendix に述べる。

## §3. Results and Discussion

Figs. 2～14の一連の図は、各格子点  $(x, y)$  における波動関数の振幅の2乗  $|a_{xy}|^2$  を3次元的な表現で描き、視覚的に電子の局在の様相をみたものである。

まず、Figs. 2(a)～(i)は  $\Gamma/V = 0$  の場合、すなわち、不規則性の全くない場合であり、よく知られた規則的な mode として  $E = 0$  付近に存在することが確認される。ところが Figs. 3(a)～(c)、 $\Gamma/V = 2$  の場合（ここでは3つの固有値のみあげた）では、その modes の痕跡は全く見出せない。電子の確率振巾は全域に乱雑にふりまかれる。Figs. 2 および Figs. 3 においては、各  $x, y$  および  $|a_{xy}|^2$  の目盛は Fig. 1 のとおりで、 $AB = 0.01$  である。Figs. 3 と同じ図を高さの縮尺をかえ、 $AB = 0.5$  として、Figs. 4 (a)～(i) に描き直してある。以後、Figs. 14まで同じ縮尺であり、各図では、 $\Gamma = 7$  の場合（固有値の個数は、計算の都合上8個）を除いて、バンド中央付近の固有値9個について示してある。また、 $\Gamma$  は

$$2 \leq \Gamma \leq 20$$

の範囲をとり、 $V = 1$  と規格化する。

Figs. 4 および Figs. 5 はそれぞれ  $\Gamma = 2$  および  $\Gamma = 4$  についての  $|a_i|^2$  の様子であり、大局的に見れば分布はならされている。 $|a_i|^2$  の最大ピークは、高々  $\sim 0.01$  ( $\Gamma = 2$ )、 $\sim 0.04$  ( $\Gamma = 4$ ) を越えない。 $\Gamma = 6$  でも (Figs. 6) その傾向は、Figs. 6 (d) および (i) (それぞれピーク値  $\sim 0.09$ ,  $0.08$ ) を除いては維持される。ところが  $\Gamma = 6.5 \sim 7.0$  (Figs. 7, Figs. 8) 間では、電子の存在確率の急激な凝集が見られ、この間で非局在-局在の遷移が起ったと判断してよいであろう。この結論は、Yoshino-Okazaki<sup>4)</sup> が正方格子に対する同様の計算から、 $\Gamma_c \sim 6.5$  と算定したことにほぼ一致するし、他の論文に発表した各種の局在のめやすとなる物理量を用いての、結論にも一致する。Figs. 8～14までの  $\Gamma \geq 7.0$  に対

する局在の様子は一見して明らかであろう。ここで、例えば、Figs.14(c)における一見2つのピークに見えるような図に関しては、 $x$ 方向の周期的境界条件を考慮すれば一つの領域の局在であることがわかる。

$\Gamma$ が大きくなれば、 $|a_i|^2$ のピーク値はごく大まかにいえば高くなる傾向があるが、各図をより詳細に検討すれば、例えば、Figs.8(h)—Figs.9(e)—Figs.10(c)—Figs.11(h)—Figs.12(i)—Figs.13(e)—

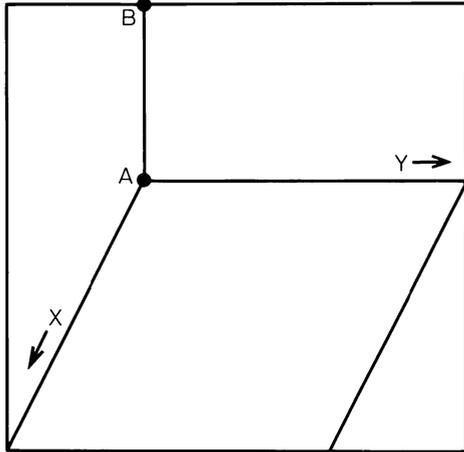


Fig.1

Figs.14(h)の一連の図のように、 $\Gamma \geq 7$ の各場合にそれぞれ対応する固有状態があるようにみえる。この対応についての確証をわれわれは得ていないが、仮にこれが成り立つとすれば、これらの図におけるピーク値は  $\Gamma = 7$ からしだいに生長し、 $\Gamma = 12$ で飽和し、それ以後ピークはくずれて行くといふことができる。

以上に見られるように、アンダーソンの予言した局在の機構は、 $N=50 \times 50$ の有限系でも、かなり明瞭な臨界値  $\Gamma_c=6.5 \sim 7.0$ において観察することができる。

#### Reference

- 1) P. W. ANDERSON, Phys. Rev. 109, 1492(1958).
- 2) 辻野, 山本, 徳永, 米沢, 日本物理学会誌 Vol.34 No.5 PP.418-421 (1979)
- 3) K. TSUJINO, M. YAMAMOTO, A. TOKUNAGA & F. YONEZAWA, Solid State Commun. to be published.
- 4) S. YOSHINO & M. OKAZAKI, J. Phys. Soc. Japan, 43, 415 (1977)

この論文を作製するに当ってお世話になった多くの人々への謝辞は論文Ⅱの acknowledgement にまとめました。

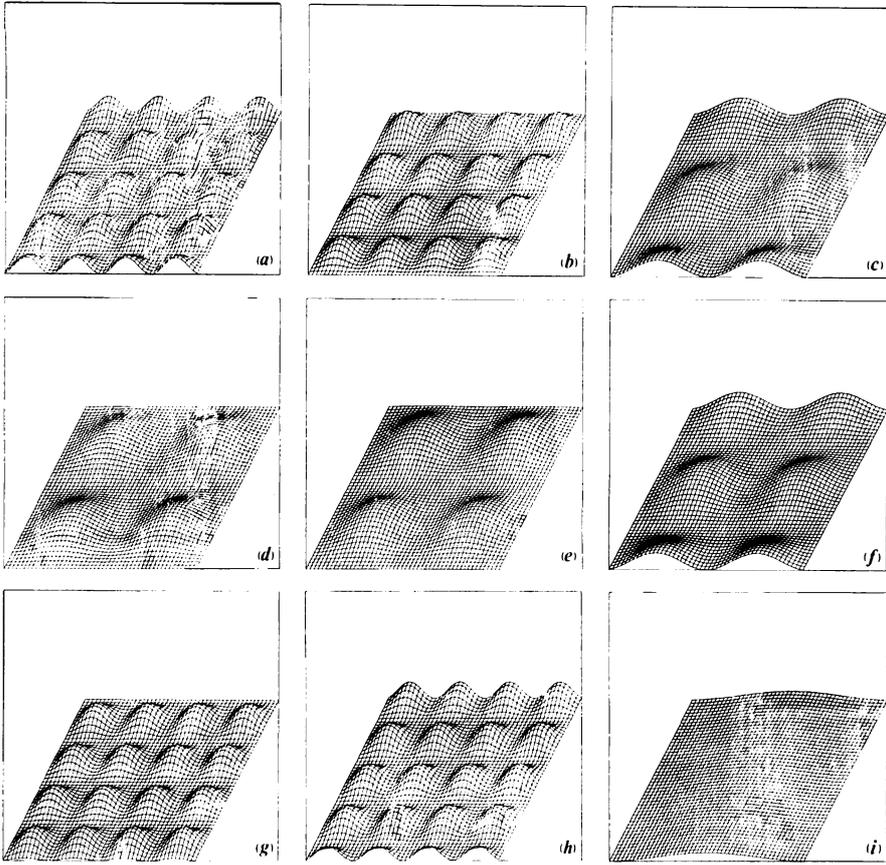


Fig.2

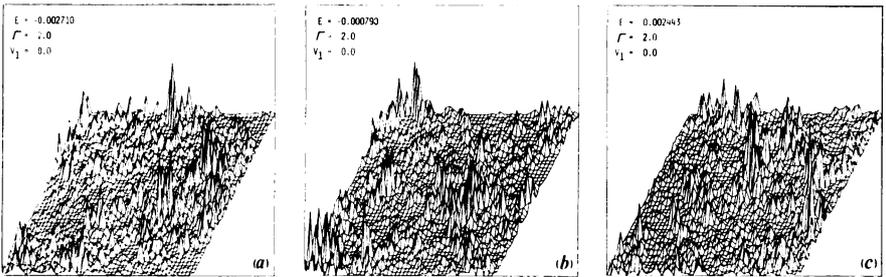


Fig.3

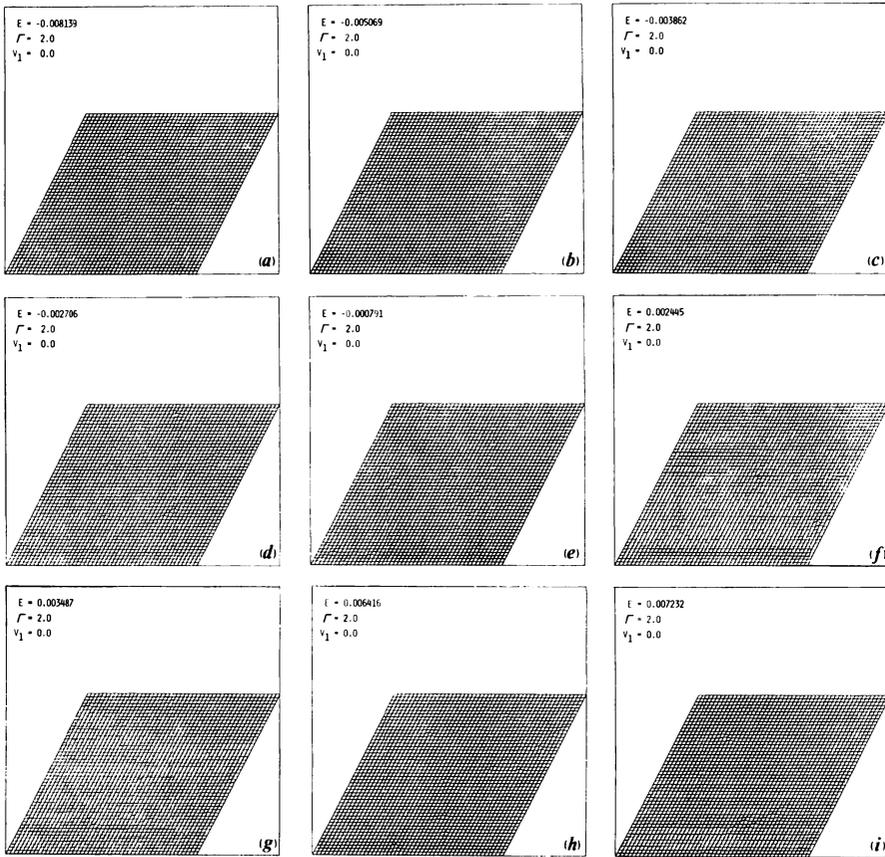


Fig. 4

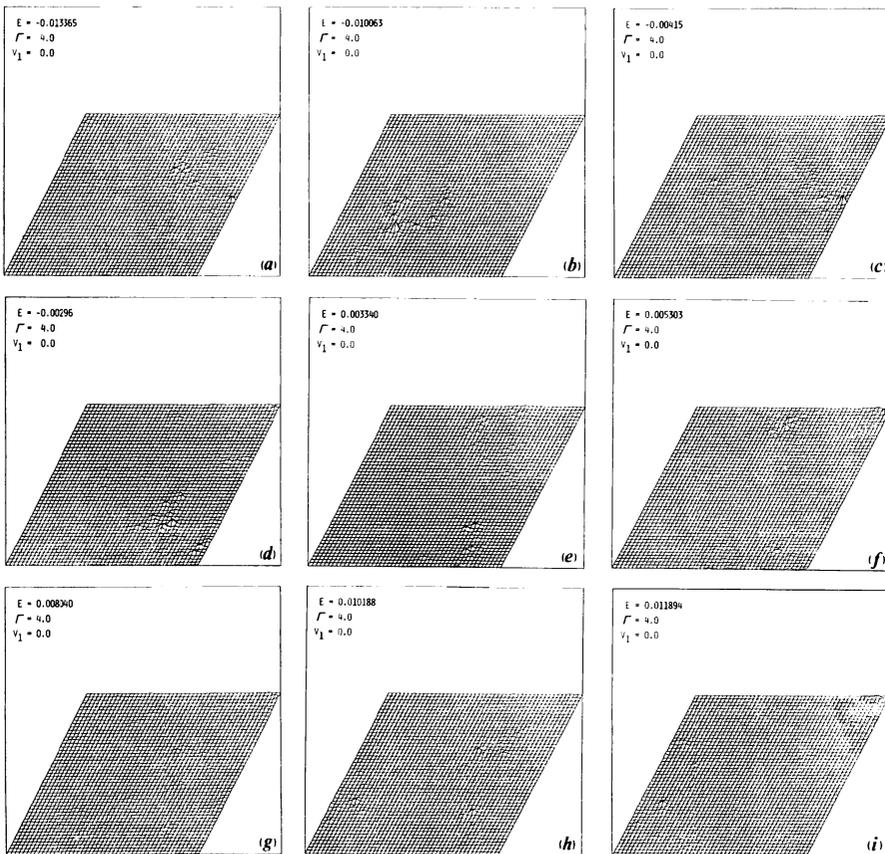


Fig. 5

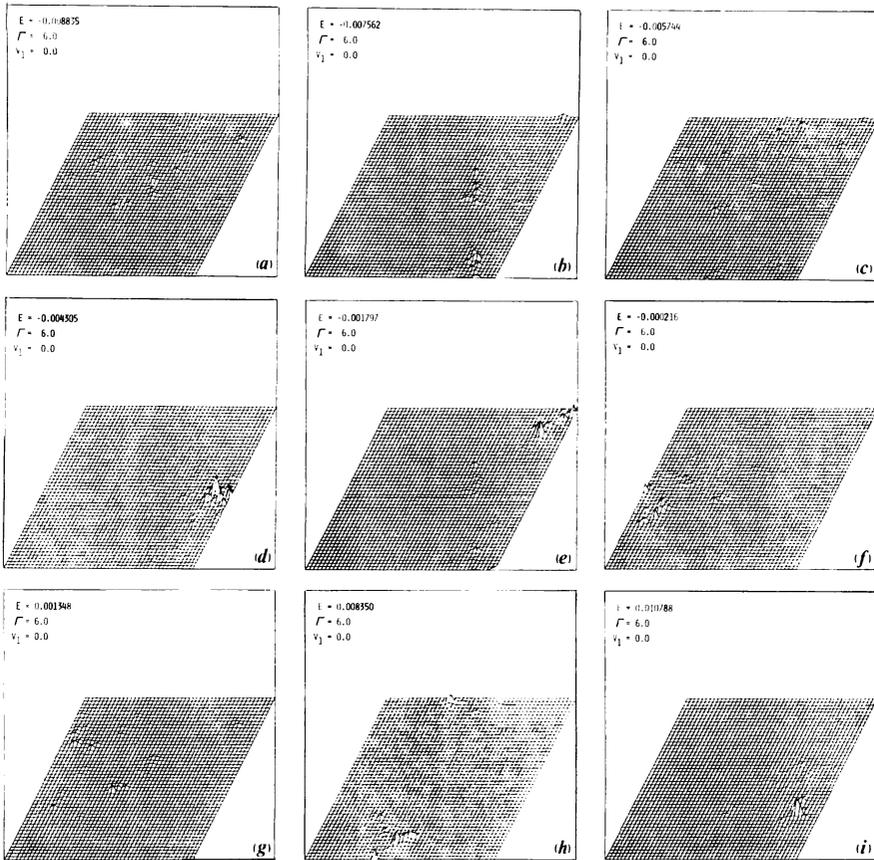


Fig. 6

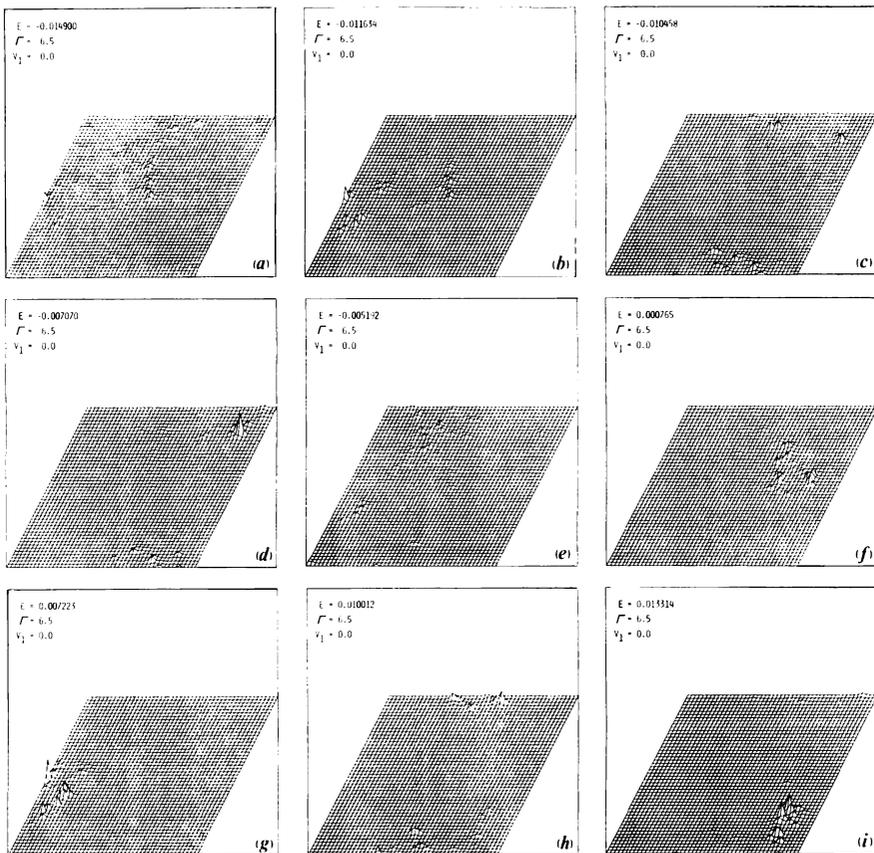


Fig. 7

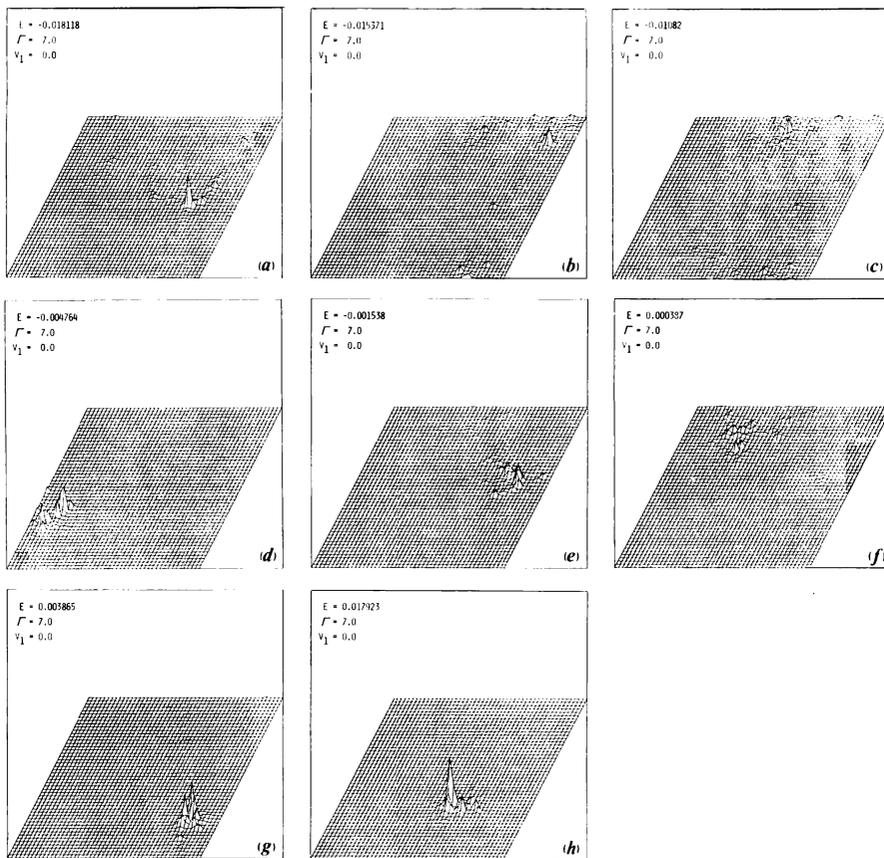


Fig.8

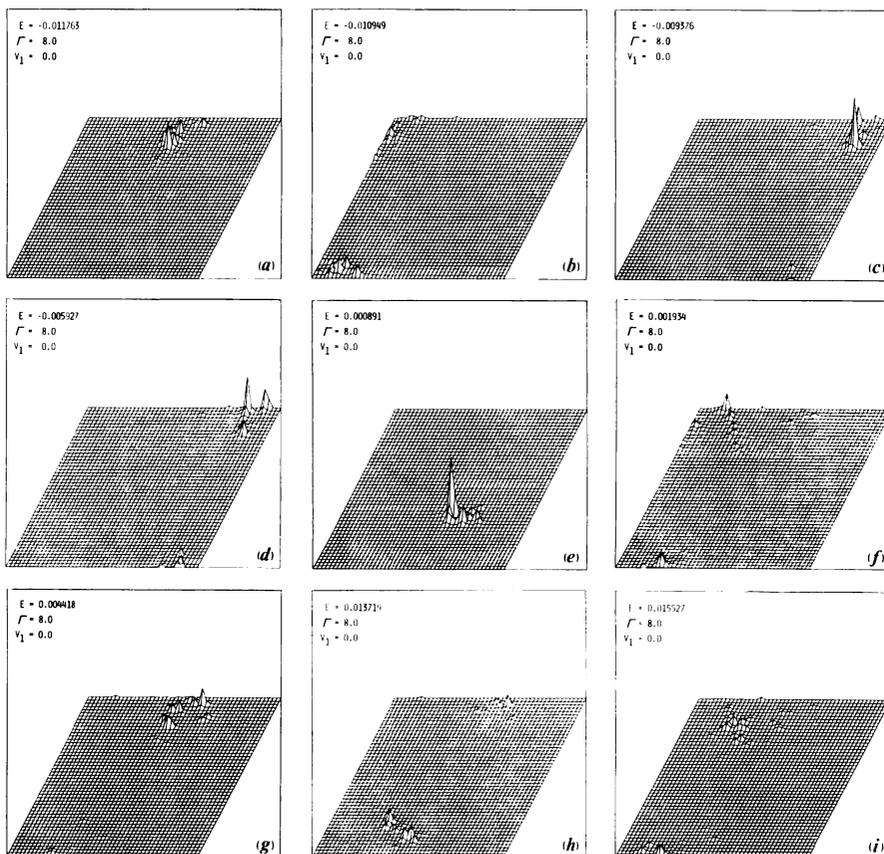


Fig.9

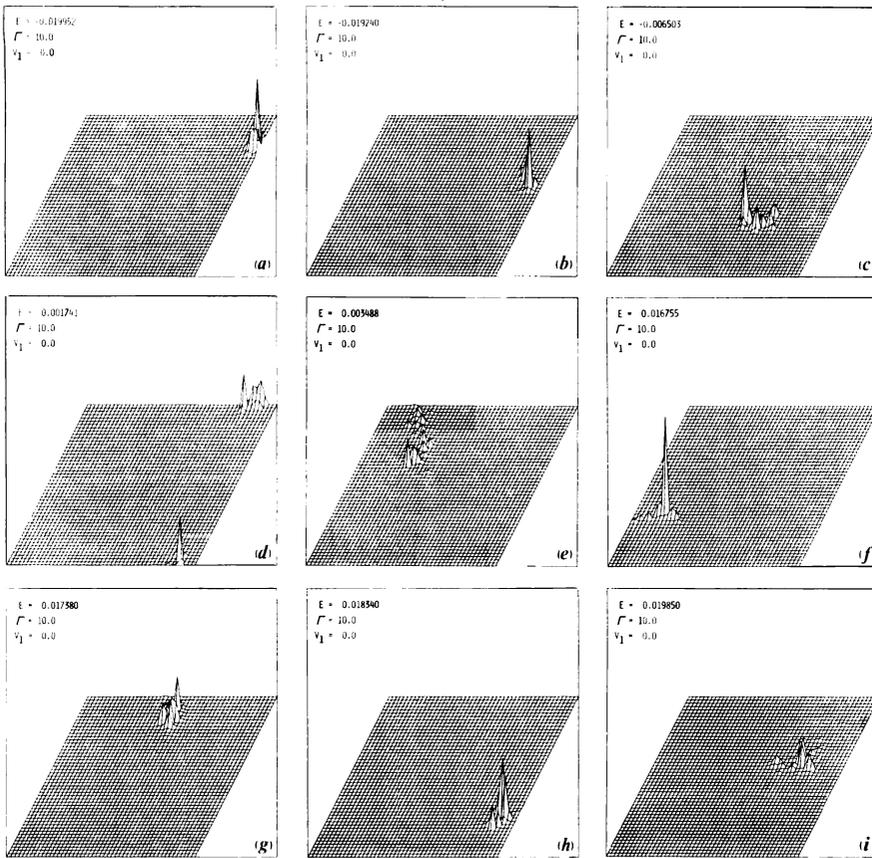


Fig .10

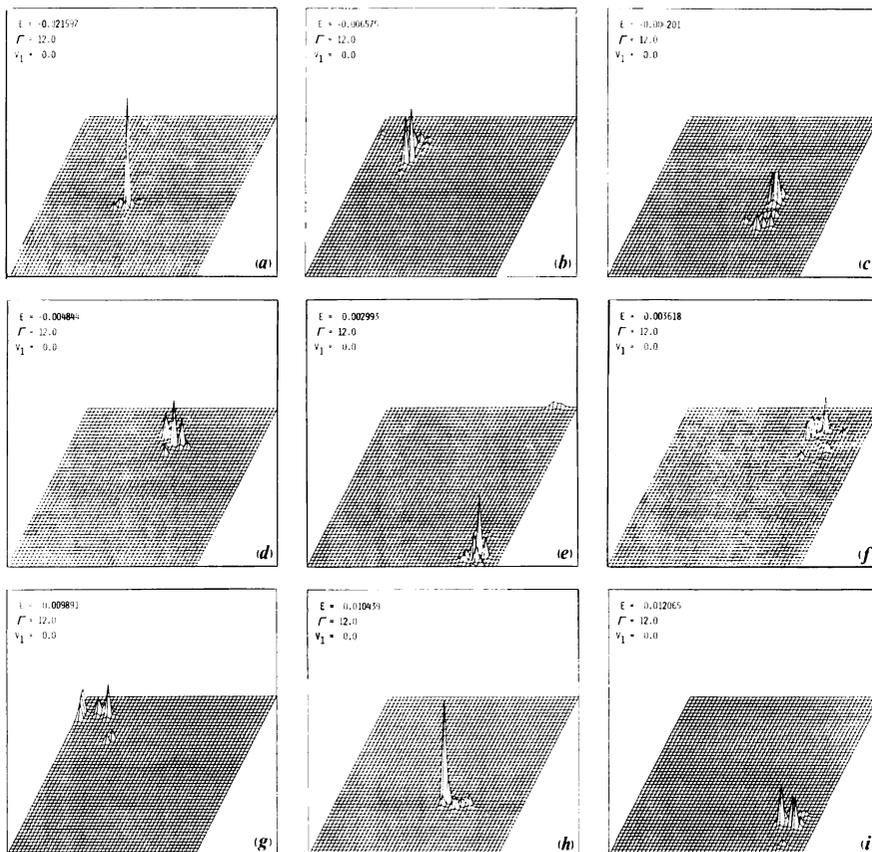


Fig .11

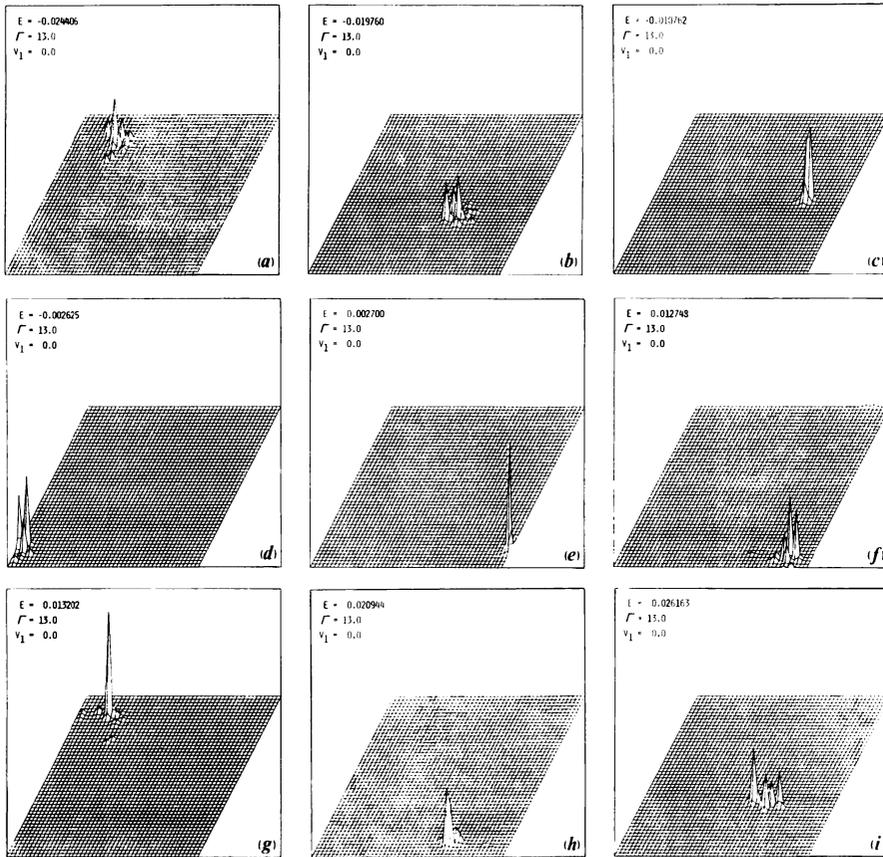


Fig. 12

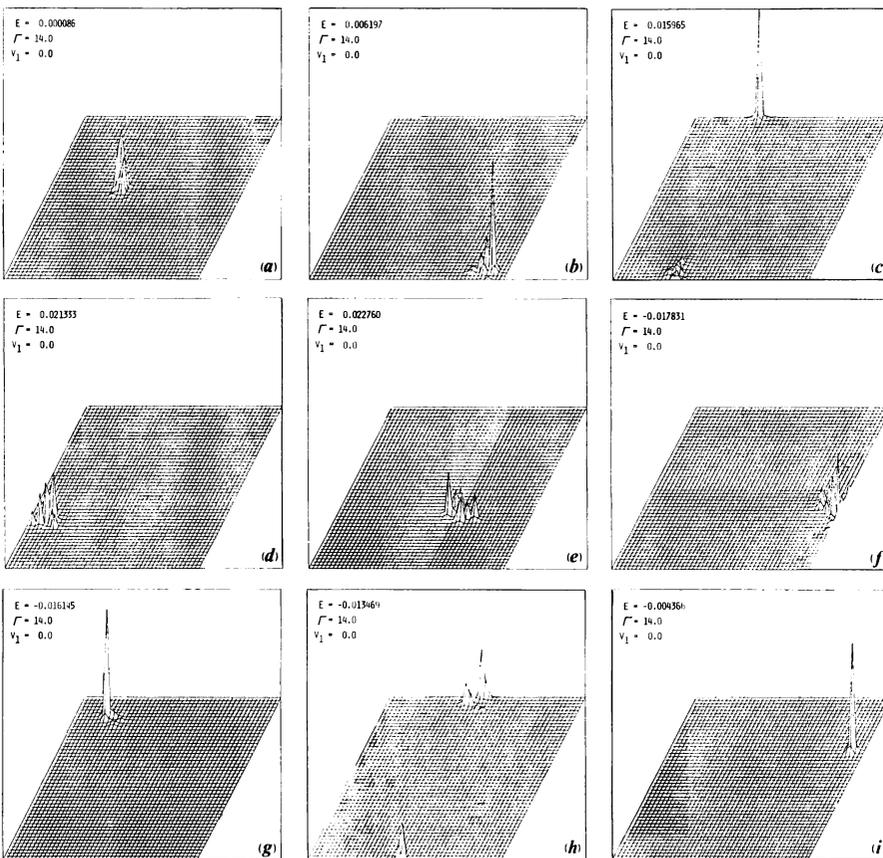


Fig. 13

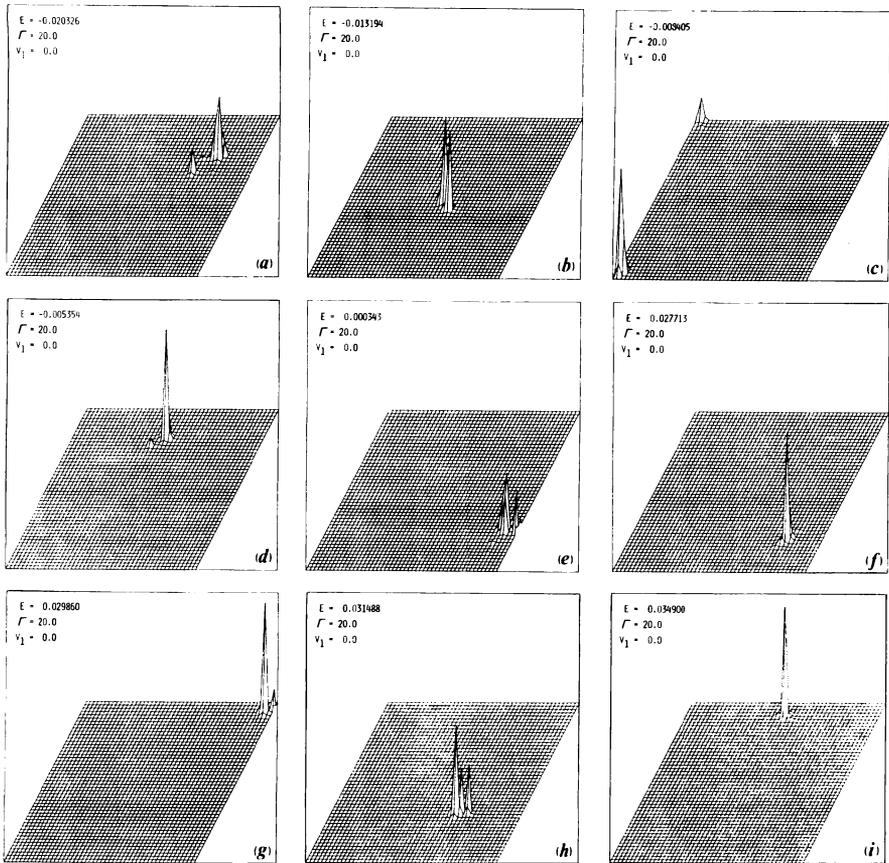


Fig .14