

電子の局在性に関する数値解析 II*

—非対角不規則系における電子局在—

辻野 啓一¹⁾

Keiichi TSUJINO

Analysis of Numerical Results for Electron Localization II

—System with Off-diagonal Disorder—

A one-electron Hamiltonian for two-dimensional square lattices composed of 50×50 sites with nearest neighbour interactions where only off-diagonal matrix elements are disordered is solved numerically. The square 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 does not take place in the system with purely off-diagonal disorder as has been predicted by Economou and Antoniou, while of course the Anderson transition does occur for diagonal disorder.

§1. Introduction

自然界に存在する物質は、すべて不規則性をもっており、われわれが実験室で生成する結晶や薄膜においても同様である。完全結晶と異なるこれらの物質内での電子の挙動を、正確には（薄膜等においてはなおさら）説明できないのは、この不規則性の存在によることは論をまたない。このような物質内での電子のふるまいを記述する場合、不規則性の種類によっても取り扱い方が異なり、その理論は現在においても十分であるとはいえない。

特に、ハミルトニアン of 行列要素にばらつきを持つ格子中の電子の局在についても、過去、不規則性の種類の相異によらず、非対角不規則系も対角不規則系と同様なふるまいをする、つまり、不規則性の程度がある臨界値以上になると、全ての状態が局在するであろう、と漠然と考えられていた。しかし、近年、Economou—Antoniou¹⁾ は非対角不規則系における局在の様子は、対角不規則系におけるそれとは本質的に異なる、という説を提示した。即ち、非対角不規則系においては、不規則性の程度を増していても、対角不規則系におけるような Anderson 局在は起こらないと予言した。その後、Weaireと Srivastava²⁾ によって局在の程度を数値的に反映する量が求められ、前述の説と矛盾しない結果が得られた。しかし、これもいくつかの状態の平均値のみを求めたもので、各々の固有値に属する状態個々については方法的に知ることはできなかった。

非対角不規則系についてより厳密な解を求め、局在の判定の尺度を確立することは、上述した議論の正確な解答を得るに、重要なことであろう。

本論文では、論文 I（対角不規則系）に続き、非対角不規則系について、われわれの一連の計算で得た直接解を最も視覚的、直観的に見ることができる図（電子の各格子点における存在確率の 3 次元

*昭和54年1月23日原稿受理

1) 大阪産業大学短期大学部

的なプロット)をもとに、電子の局在性について考察する。

§2. Hamiltonian

モデルとして、われわれは 50×50 の次元をもつ2次元正方格子を取り扱う。既に論文Iで見たように、この次元数は局在-非局在の議論をするに十分な大きさである。

強結合 Hamiltonian

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

で表わされる非対角不規則系を考える。ここで、 $a_i^\dagger(a_i)$ 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。) 又、 ϵ は定数とし、 $\{V_{ij}\}$ は非対角不規則性の程度を V_1 とすると V_0 を中心に $[V_0(1-V_1/2), V_0(1+V_1/2)]$ で一様に分布させる。実際の計算には $\{V_{ij}\}$ には一様乱数を用いた。境界条件は X 方向には周期的、 Y 方向には剛体壁を設定し2500次元の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、

$$0 \leq V_1/V_0 \leq 18$$

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, 京大大型計算機センター 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論文 I と同様に Lanczos 法によった。

§3. Results and Discussion

Figs. 2 ~ Fig. 11 の一連の図では、Fig. 1 に示す座標がとられ、A B間が0.5になるように縮尺が定められ、各図における固有値はバンド中心付近 ($E \sim 0$) の9個を選んだ。

Figs. 2 (a)~(i) ($V_1=0.5$) では、あまり顕著なピークは見あたらない。Figs. 3(a)~(i)は $V_1=2$ の場合であり、ところどころに小さな単独のピークがあるが、これは論文Iで $V_1=2$ の場合(非局在)と比べると、同じ非局在であっても質的な相異が見られる。また、Figs. 3(c)と(d), (b)と(e)は固有値の絶対値が同じ対称な解である。

Figs. 4, 5 (a)~(i)に、それぞれ $V_1=4$, $V_1=6$ の場合を示す。 $V_1=2$ の場合と本質的な差異は見られないが、各ピークは群雄割拠の様相が目立ってくる。ところどころに大きなピークが見られるが、Anderson 型の局在とは質的に異なる。

Figs. 6 (a)~(i) ($V_1=8$) から Figs. 11(a)~(i) ($V_1=10$) は、このような傾向が表われることを確認するために求められたものであり、これらも Anderson 型の局在を示しておらず、 V_1 が大きくなっても Anderson 型の局在が起らないことは明らかである。

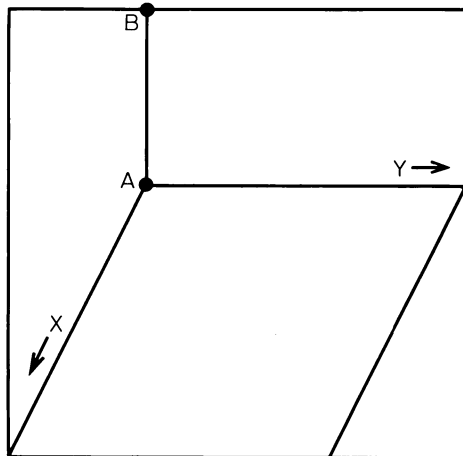


Fig. 1

Acknowledgement

この一連の研究は著者らと米沢富美子氏(京大基研)との共同研究の一部をなすものである。

計算機の使用に際して、名大プラズマ研究所の犬竹正明氏、上村鉄雄氏、阿部芳彦氏に御助言、御協力いただきましたことに、感謝致します。また京都大学の計算機使用に際しては、京大基研の広部

繁子氏に多大な援助をいただきましたことを感謝致します。

なお X - Y プロッタの3次元的表现については、名大、秦野和郎氏製作のサブルーチンを使用させていただきました。

Reference

- 1) E.N. ECONOMOU & P.D. ANTONIOU; Solid State Commun. 21, 285 (1977).
- 2) D. WEAIRE & V. SRIVASTAVA; Solid State Commun. 23, 863 (1977)

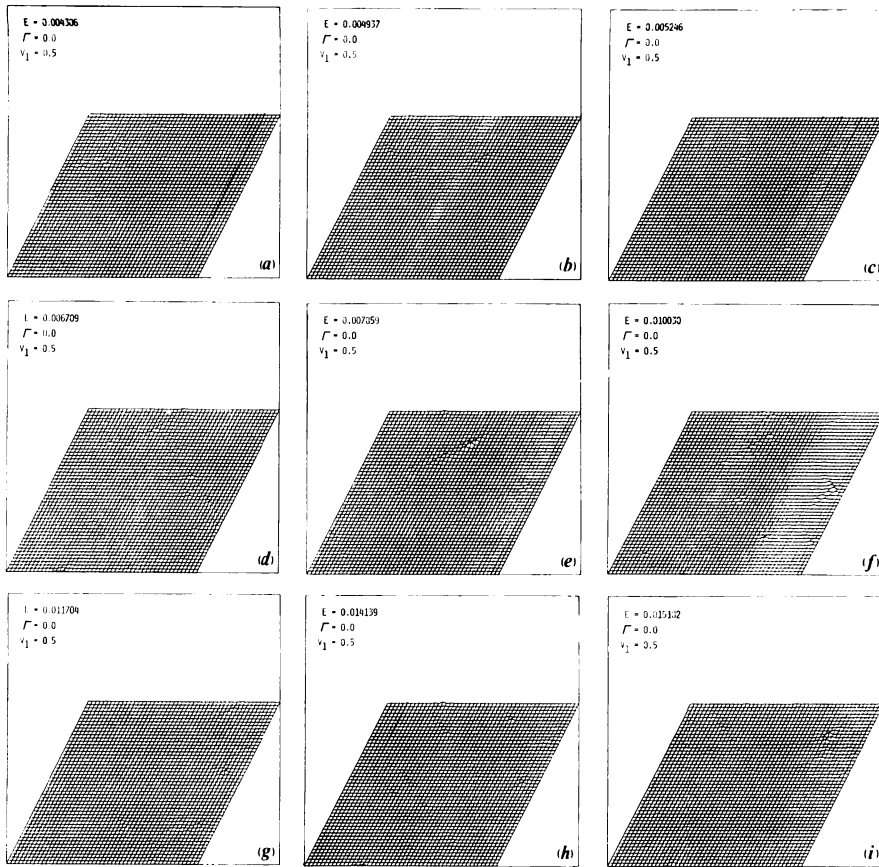


Fig.2

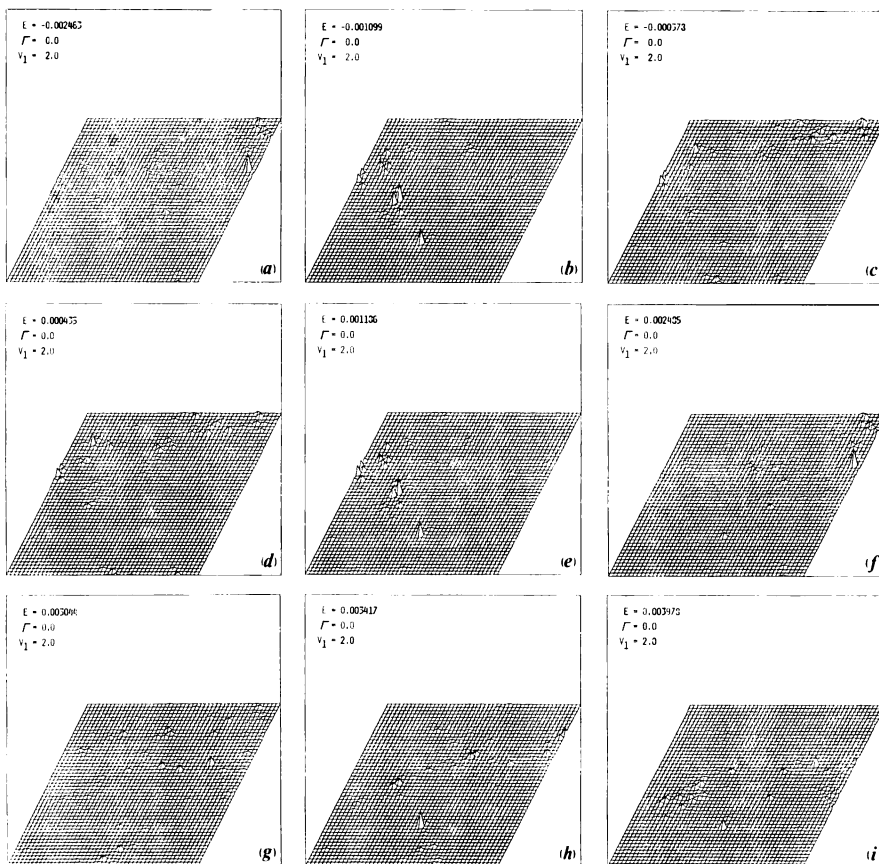


Fig.3

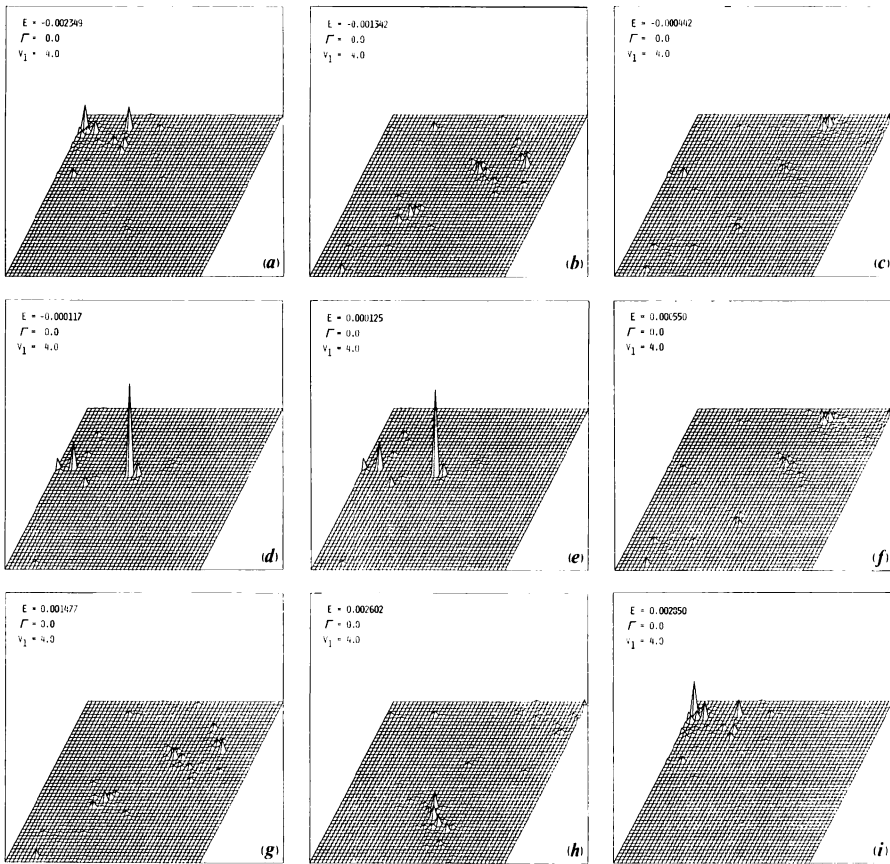


Fig. 4

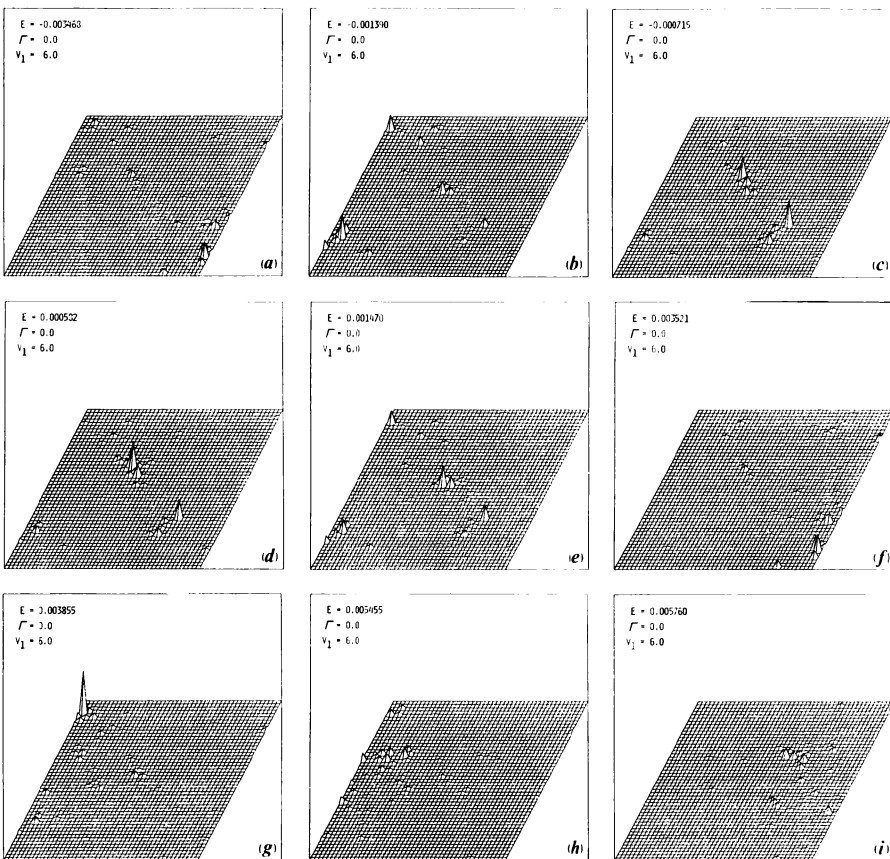


Fig. 5

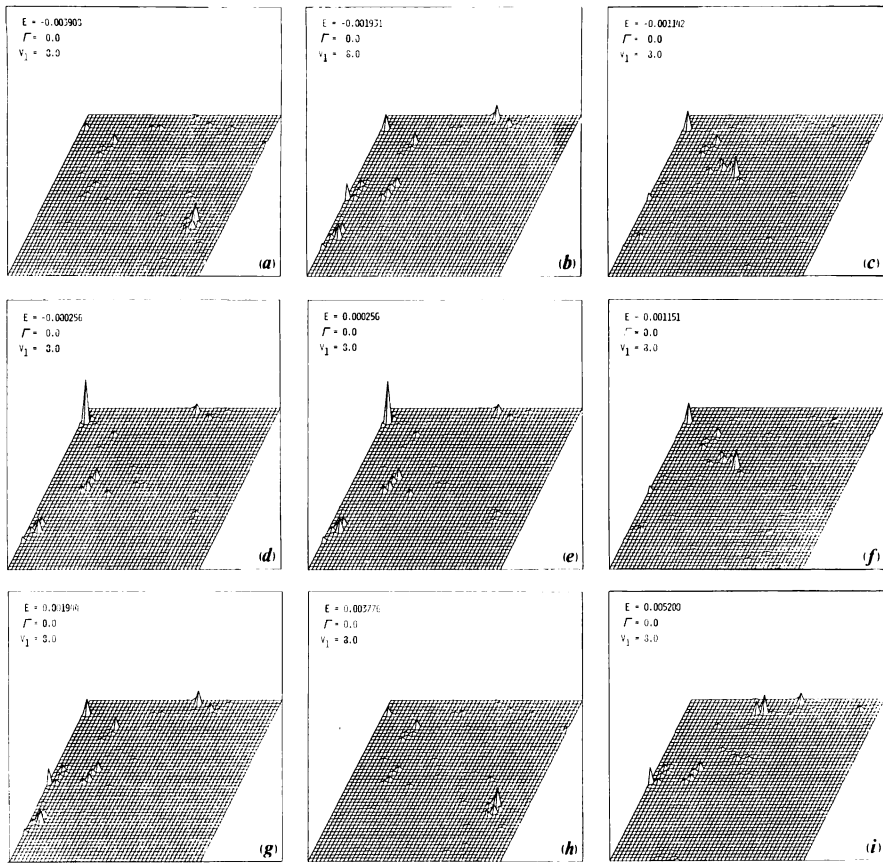


Fig.6

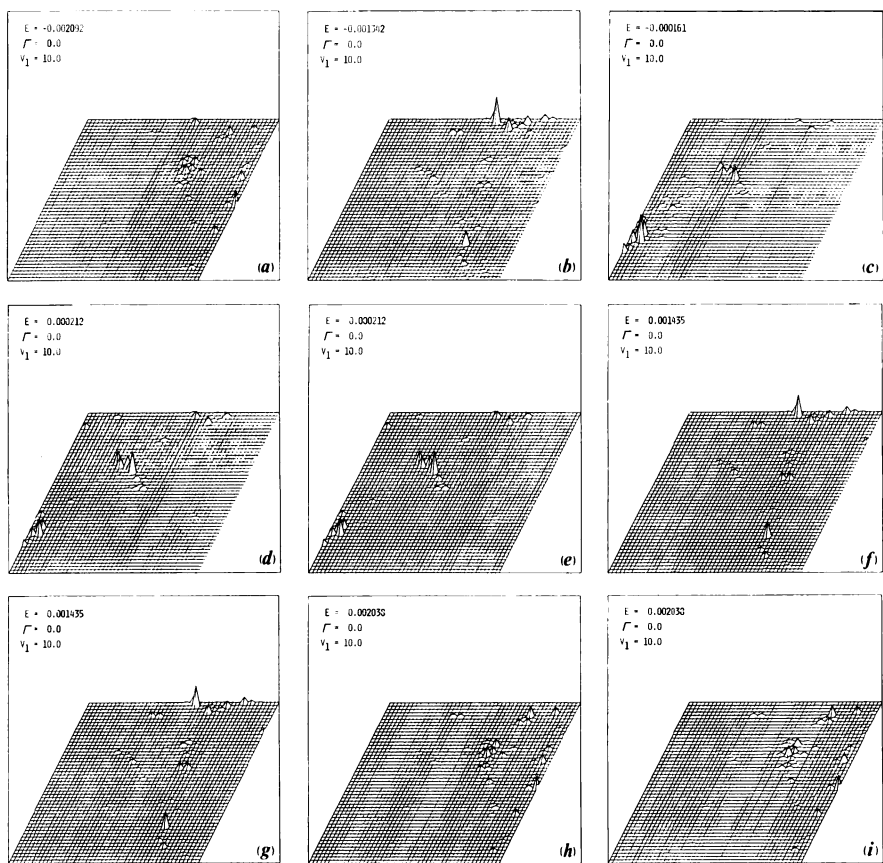


Fig.7

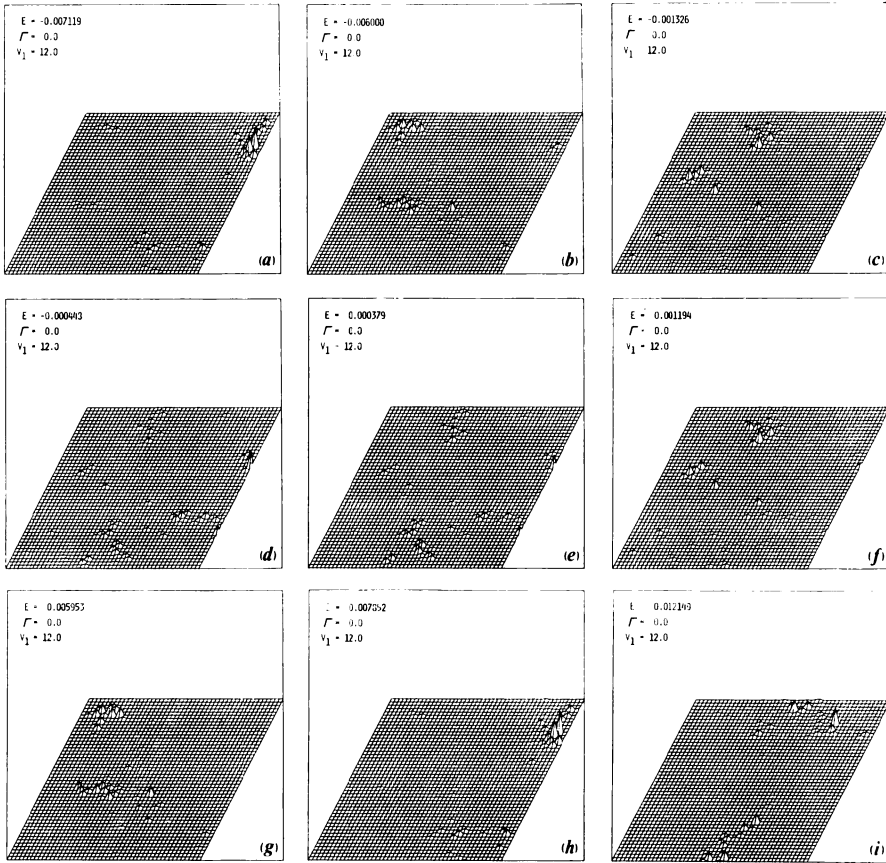


Fig. 8

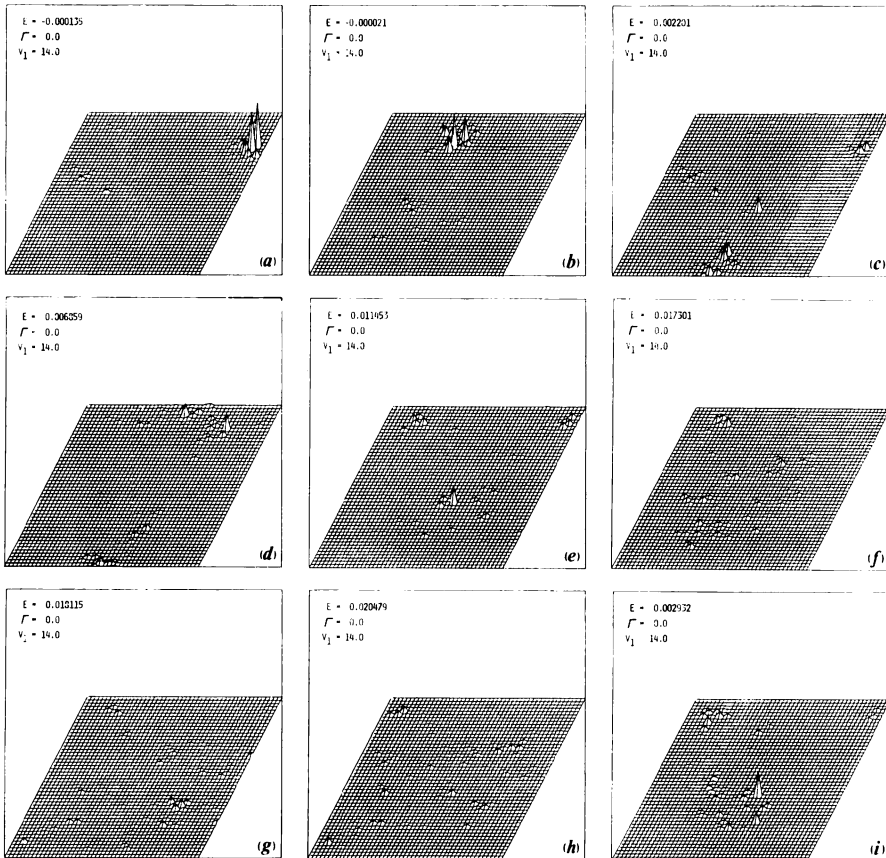


Fig. 9

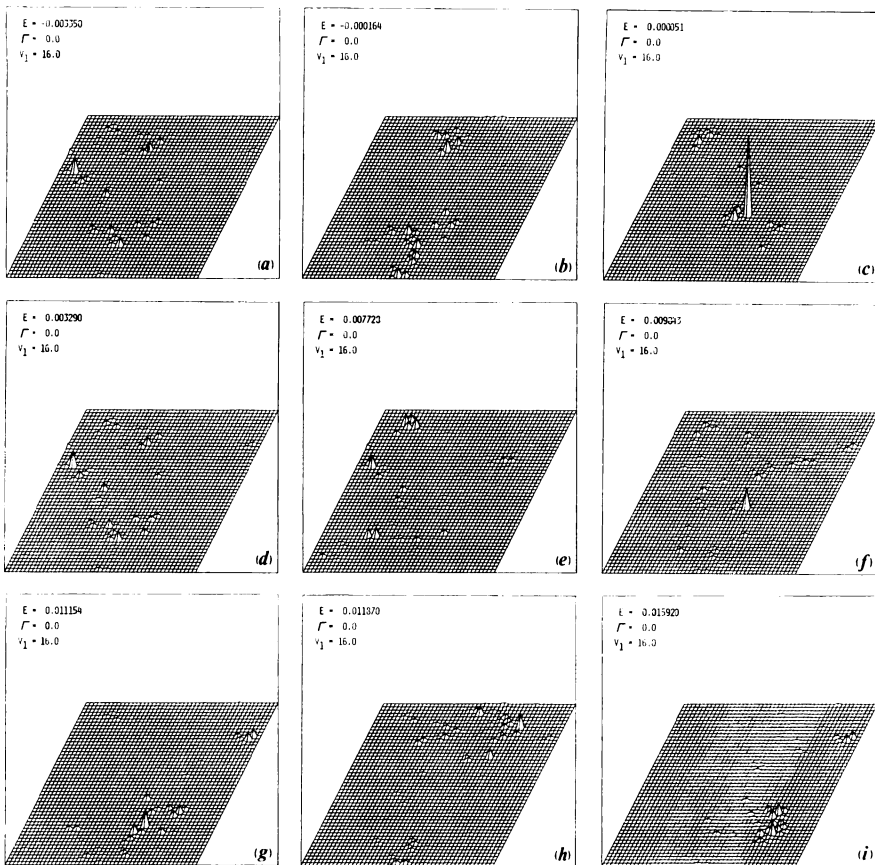


Fig .10

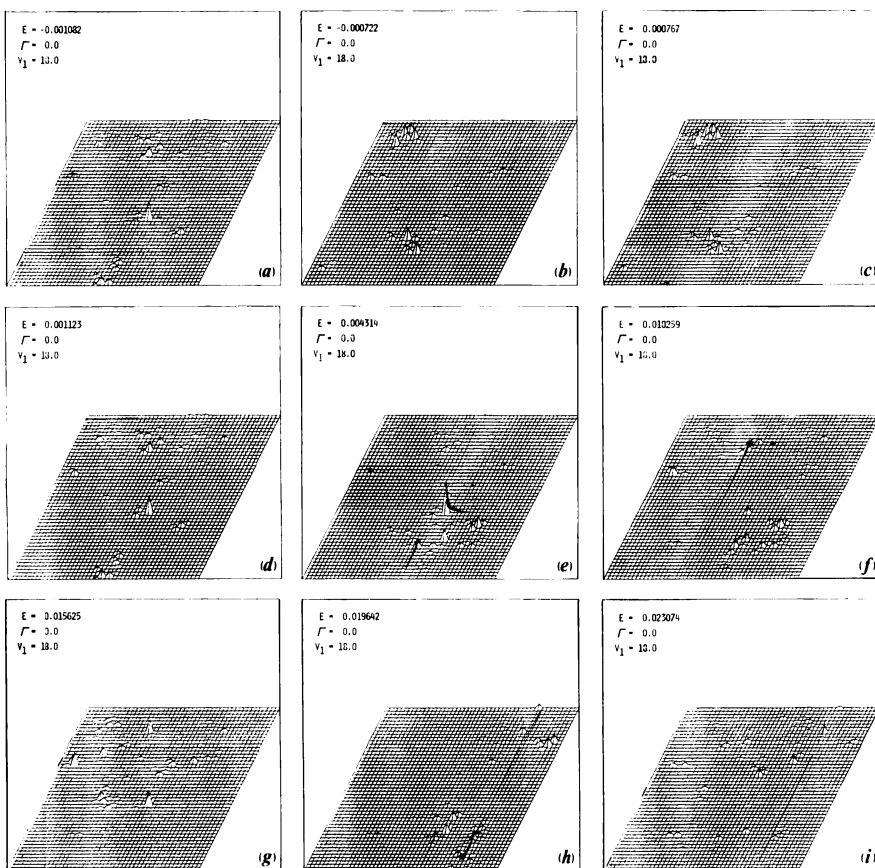


Fig .11