

2次元ランダムネットワークにおける電子局在*

LOCALIZATION OF ELECTRONS IN TWO-DIMENSIONAL RANDOM NETWORKS

辻野 啓一¹⁾ 山本 正樹²⁾ 徳永 旻³⁾
 Keiichi TSUJINO Masaki YAMAMOTO Akira TOKUNAGA

ABSTRACT

By regarding an infinite cluster of the bond percolation path as a possible model of a random network, we examine the effects of topological disorder on the shape of the density of state and on the behaviours of the wavefunctions.

1. 緒 言

不規則系の古典的な取り扱いの1つにパーコレーションの問題がある。古典的パーコレーションの問題とは、量子効果などの複雑な要素をできるだけ取り除いて古典的なパスのつながりを考えるものである。この問題はもともと樹木内の肥料の浸透や病気の伝播などへの応用から始まったものであるが、その後、古典粒子の局在の問題、希薄合金におけるイジングモデルの問題、自己排除酔歩の問題、相転移の臨界点近傍での問題、ランダムネットワーク上の輸送問題などから広く研究されている。パーコレーションそのものは一見非常に簡単な問題のようにみえるが、不規則系の本質にふれるような示唆を与える例がいくつか示されてきている。

理論的考察としては規則的に並んだ原子サイトの集まりが最隣接サイト間をつなぐボンドでつながれている場合を考える。このとき、サイト問題とボンド問題とが定義できる。サイト問題とは、任意のサイトが原子で占められる確率が x である特定の原子が無限の大きさのクラスターに属している確率（浸透確率 $P^s(x)$ ）はどれだけになるか、いい換えればその原子が試料の一方の境界から他方の境界まで伸びている経路上にある確率はいくらか、という問題である。ここで $x < x_c$ について $P^s(x)$ が測度零となるような x の上限値 x_c が定義される。一方ボンド問題では、最隣接サイトを結ぶボンドが確率 p で通過可能である場合を考える。サイト問題同様、あるサイトの原子が無限クラスターの上ののっている浸透確率 $P^b(p)$ を求めることが問題になる。この場合にも、臨界浸透濃度 p_c が定義され、 $p < p_c$ に対して $P^b(p)$ は測度零である。パーコレーションの問題において前述の x_c 、 p_c を求めることが最も大きな問題となり、ボンドパーコレーションの問題においては、たとえばつながっているボンドを見出す確率を P として、つながっているボンドと切れたボンドの分布

$$P(V_{ij}) = p\delta(V_{ij} - V) + (1-p)\delta(V_{ij}) \dots \dots \dots (1)$$

を考えた場合、 p_c は厳密に求まり、正方格子の場合、 $p_c = 0.50$ が得られている。

前述のように古典的パーコレーションの問題においては、量子効果などの要因は考慮にはいっていない。しかし量子効果の大きい微視的粒子を扱う場合、特に Andevson の問題¹⁾の場合においては量子取扱が必要になる。

*昭和59年4月16日原稿受理

1), 2) 大阪産業大学短期大学部 3) 大阪産業大学教養部

置換型不規則系（原子の位置は格子を組んでいるが格子点にある原子の種類が不規則であるもの）の問題については以前に述べたが、現時点における不規則系の研究は、ほとんどこのタイプのものに限られている。他方、位相幾何学型不規則系（原子の位置や共有結合の手のなすネットワークも不規則であるもの）における局在に関する我々の知識はほとんどない。この方面の研究の遅れている理由の1つは、状態密度を求めるのに有力である有効媒質近似の方法が、これまでのところ考えられていないためである。置換型不規則系の場合には有効媒質を対応する規則結晶格子にとればよいことは明らかであったが、位相幾何学型不規則系においては、有効媒質の原子構造として、どんな構造を選べばよいか明らかでないからである。

このような情況にあるので、電子の波動関数の振舞いを直接取扱って、その局在の有無を考察するという研究はほとんど未開拓である。そこで本論文においてはランダムネットワークモデルを解析することにより、位相幾何学不規則性の局在における一般的効果を以下の順序で考察する。

- 1) バンド端付近とバンド中心の状態密度の特性を調べる。
- 2) このランダムネットワークモデルにおいて $E \approx 0$ と $E \neq 0$ で計算された波動関数の空間的な変化の様相を調べる。

2. モデル

本論文のモデルシステムは簡単のため単一バンドについて考察される。したがってハミルトニアンは、

$$H = \sum_i |i\rangle \varepsilon_i \langle i| + \sum_{i,ip} |i\rangle V_{ip} \langle ip| \dots\dots\dots (2)$$

ただし ε_i は i 番目のサイトのサイトエネルギー、 V_{ip} はサイト i と隣接格子間との相互作用、によって記述される。ここで直交基底関数 $|i\rangle$ は規則格子のサイトの隣接格子を表わす。 ε_i を 0 にとり、 V_{ij} の分布は

$$P(V_{ij}) = p\delta(V_{ij} - V) + (1-p)\delta(V_{ij}),$$

ただし $V < 0$, $\dots\dots\dots (3)$

により与えられるものと仮定する。この仮定は前述したように古典的ボンドパーコレーション問題に対応する。すなわち P は破壊されていないボンドが見いだされる確率である。ここでは1つのボンドパーコレーションの無限の経路（あるいはクラスター）をある P における1つのランダムネットワークとみなした。

P の小さいとき、このモデルはアモルファス Si あるいはアモルファス Ge のように共有結合の手がすべてこのボンドがつながったランダムネットワークを形成していて、サンプル全体で原子の配位数が変りがないような理想アモルファス半導体のモデルになぞらえられる。他方 P が大きいとき配位数が原子間で変化し、破壊されたボンドがダングリングボンドのはたらきを演ずるようなアモルファス Si:H 構造のモデルと考えられる。

このモデルの限界はもとの格子が正方あるいは単純立方格子であるとき、偶数ボンドでできたリング（以下偶数リングで記す）しかこのモデル系には存在しえないことにある。一方すべてのボンドがつながった連続ランダムネットワークは奇数ボンドでできたリング（以下奇数リングと記す）を必ず含んでいる。しかし局在の議論をするという我々の目的にはこのモデルで十分である。との理由は次のように説明される。奇数リングの存在はそれが無い場合とくらべて余分な散乱の原因となる。したがって偶数リングのみをもつ系において、もしある P ですべての状態が局在しているならば、偶数リング以外にも奇数リングを含んだ系においては同じ P でさらに強い局在の状態にあることになる。ゆ

えに偶数リングの系における局在の判定条件は少なくとも奇数リングの系における存在の上限を与えることになる。

上の議論では、古典的なボンドパーコレーションと対比して論及してきたが、実はこのランダムネットワークモデルはサイトパーコレーションとも対比できる。なぜならばボンドの欠落にともない派生したサイト上の電子の局在確率は量子論的には必ずしも 0 である必要はないので、ボンドの人為的除去によって何ら特異な効果は発生しないことになる。言いかえると、サイトがないところの波動関数の振幅が 0 に等しくないということが古典的なサイトパーコレーションとは本質的に異なる位相幾何学不規則系の様相である。

3. 状態密度

前節で定義されたように、理想的でないランダムネットワーク（すなわち、すべてのボンドがつながっているとは限らないようなネットワーク）エネルギースペクトルは $\Psi = \sum_i a_i |i\rangle$ としたときの Schrödinger 方式 $H\Psi = E\Psi$ の解より評価することができる。系のエネルギーを次のような形に書かれる。即ち

$$E = \langle \Psi, H\Psi \rangle = V \sum_{(i,i_p)} [a_i^* a_{i_p} + a_i a_{i_p}^*], \dots\dots\dots (4)$$

ここで $\sum_{(i,i_p)}$ は破壊されていないボンド (i, i_p) 全体についての和を示す。波動関数は $|\Psi|^2 = \sum_i |a_i|^2 = 1$ のように規格化されている。Yonezawa-Cohenによれば、奇数リングを伴う連続ランダムネットワークの状態密度は Fig. 1 (a) および(b)に示される。すな

わち理想的なランダムネットワークのそれは Fig. 1 (a) のようにバンドの下端（結合状態に該当する）では通常バンド端の形をもち、バンドの上（端反結合状態に該当する）では Lifchitz バンド端の形をとることが示されている。

Yonezawa-Cohenのこの主張を我々のモデル系に適用すると、次のような結論が得られる。ここで Schwartz の不等式の局所密度の原理に基づいた Lifchitz の議論を用いる。結果としてダングリグボンドを含む我々のランダムネットワークのエネルギースペクトルは、 $-Z|V| \leq E \leq Z|V|$ の範囲で与えられる。ここでは Z はもとの格子の配位数であり、両方のバンド端は Fig. 1 (b) に描かれるように Lifchitz 限界である。当然バンドの裾の状態は局在している。一方光学エネルギー E_{op} 近辺の状態は非局在であるという信ずるにたる理由がある。 E_{op} は $p \cdot Z|V|$ と見積られる。この結果を更に詳しく言い表わすと次のように記述することができる。すなわち、理想連続ランダムネットワークあるいは理想的でないランダムネットワーク（ダングリグボンドを含めた我々のモデル）のいずれの場合も、位相幾何学型不規則性はバンド幅には影響しなくて、バンド端の特性を通常ふるまいから Lifchitz 的バンド端ふるまいに変化させる傾向にある。このことは、バンドを拡げるのに主に働く定量的な不規則性（位相幾何学的でない不規則性）の効果と比較して、特筆に値するものである。

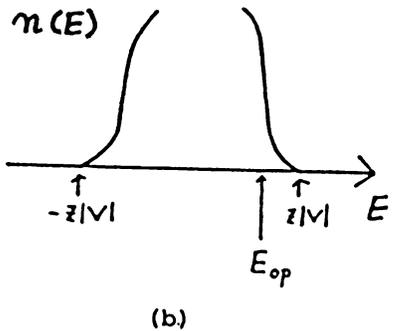
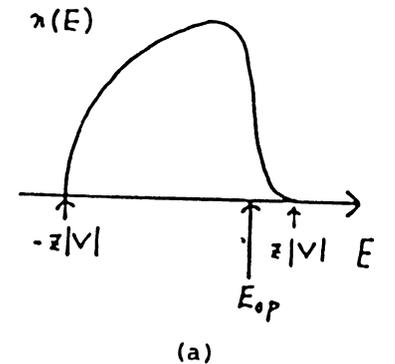


Fig.1(a) The density of state (DOS) for an ideal random network (after Singh, Cohen and Yonezawa)
(b) The DOS for the present model of a random network.

本モデルについて有効媒質近似を用いて求めた状態密度の計算は、すでに Yonezawa-Odagaki³⁾ によってなされたものの追試であるが、次の第 4 節の議論との関連で必要であるので Fig. 2 に示す。特徴的な性質は以下の事項である。すなわち、小さな P の値について $E=0$ においてピークが現われる。そして $E=0$ の両サイドにギャップが現われる。この状態密度の性質はボンドパーコレーションモデル⁷⁾における計算機シミュレーションによって見つけられた傾向と一致する。これと関連して興味ある事実は、サイトパーコレーションモデルについて $E=0$ 付近の状態密度において Fig. 2 と同じ傾向があらわれることである。

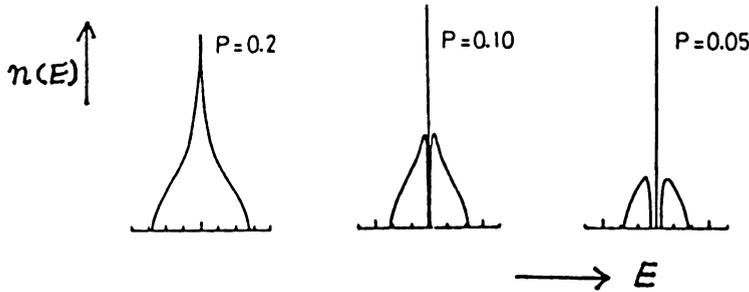


Fig. 2 The average DOS for the present model of a random network in a cubic lattice. The calculation was performed on the basis of the HCPA.

4. 波動関数のふるまい

本論文では 50×50 (=2500) 個のサイトを含む正方格子を扱う。サイト数を 10×10 から順に増して行き、サイズ効果をチェックし、 50×50 の大きさは、局在の問題を議論するには十分大きいと結論した。一方向に周期的境界条件、他の方向に自由端境界条件を設定した 2500 個のサイトを含む正方格子について波動関数を解き、固有ベクトルの 2 乗 $|a_{xy}|^2$ の値を求めた。計算は大阪市大計算センター FACOM-230-60、京大大型計算センター M190 および名大プラズマ研究所 M190 を使用した。大型行列計算法は Lanczos 法によったがその詳細は本学論集 57・58 号、P. 61 に述べた通りである。Fig. 3

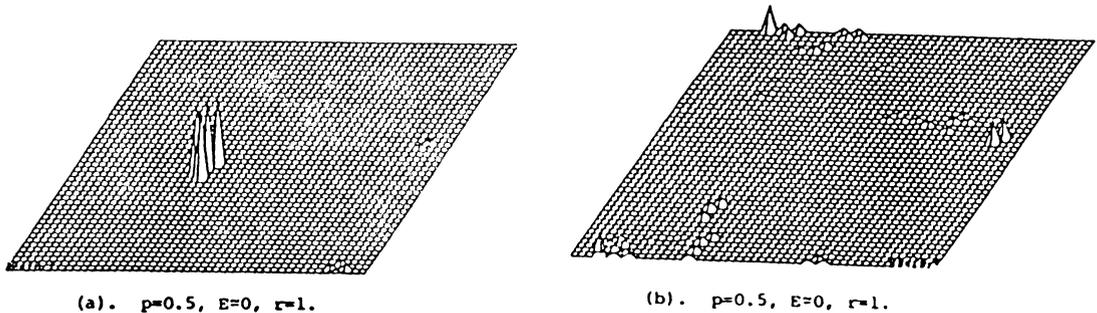


Fig. 3 (a) and (b) The two wavefunctions corresponding to center of the band ($E \approx 0$) for $p = p_c = 0.5$.

および 4 における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、視覚的に電子の波動関数の様相を見たものである。Fig. (a) および (b) にバンド中心に ($E \approx 0$) に該当する正方格子でのボンド問題についての臨界パーコレーション濃度 $p = p_c = 0.5$ についての 2 つの波動関数が示されている。r はスケール拡大の割合であることを注意しておこう。これらの図より以下のことが明らかに見られる。すなわち、古典的パーコレーションにおける臨界の値においても、状態はまだよく局在している。Fig. 4 (a) および (b) は $P = 0.8$ における結果を示したものである。両方の図は同じ固有関数を表わしているが、拡大の割合は (b) については (a) の場合より 5 倍大きい。サイト問題における峰状の局在がここでも検出されている。もっと大きい P の値 $P = 0.9$ に対する $E \approx 0$ の結果が Fig. 5 (a) から (c) に与えられている。峰状局在は破壊されないボンドの確率 P がこのように大となっても、なお観測される。 $P = 0.9$ についてバンド中心をはずれた $E \approx 3$ の波動関数

が Fig. 6 に示されている。波動関数のふるまいはバンド中心の状態のそれとは明らかに異った形であり、この場合波動関数はより非局在であるように見える。

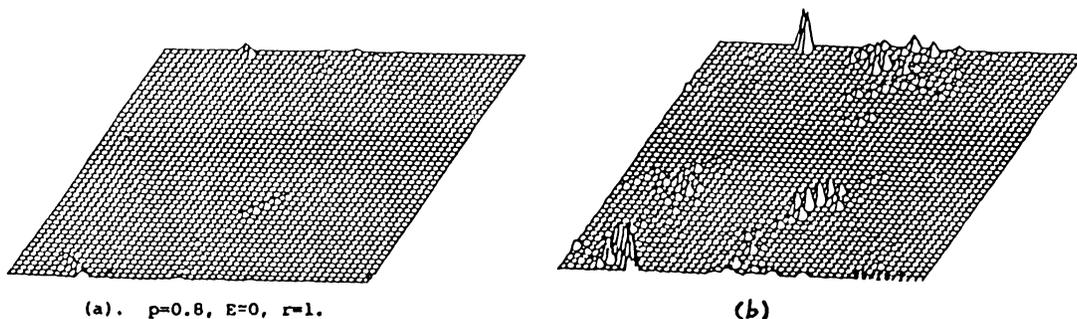


Fig.4(a) The wavefunction corresponding to center of the band ($E \approx 0$) for $p=0.8$.
 (b) The same as Fig.4(a) with $r=0.5$.

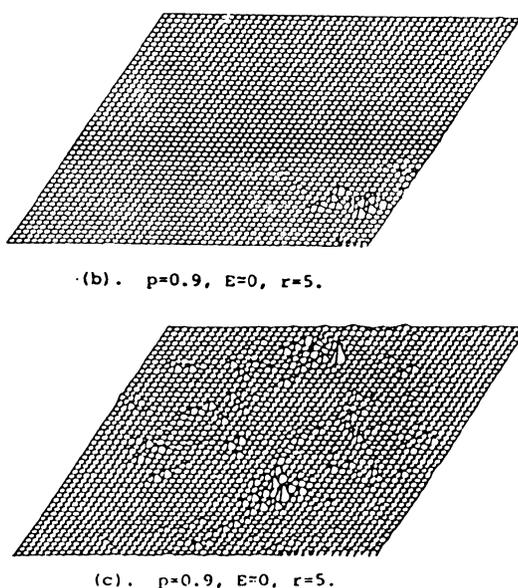
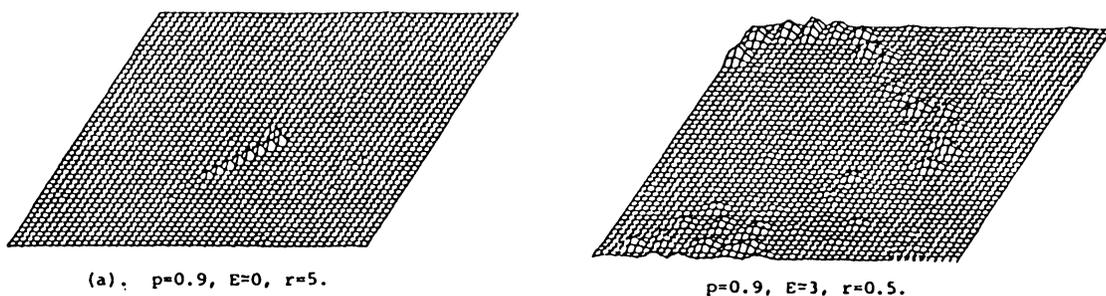


Fig.6 The wavefunction corresponding off center of the band ($E \approx 3$) for $p=0.5$ with $r=5$.

Fig.5(a), (b) and (c) The wavefunctions corresponding to center of the band ($E \approx 0$) for $p=0.9$ with $r=5$.

5. 結 言

本論文の内容を要約すれば、次のようにまとめられる。

- (1). 量子的パーコレーションについての臨界濃度は古典的パーコレーションについてのそれよりも明確に大である。
- (2). 比較的大きな非破壊バンド濃度においてさえ峰状の局在と線状の局在は明らかにおこっている。

終りに、本研究を遂行するにあたり、一部、大阪産業大学産業研究所特別研究費の助成によりなされた。記して謝意を表す。

参 考 文 献

- 1) ANDERSON P. W., Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- 2) 例えば TSUJINO K., YAMAMOTO M., TOKUNAGA A. & YONEZAWA F., Solid State Commun. **30**, 531 (1979) TSUJINO K., YAMAMOTO M., TOKUNAGA A. & YONEZAWA F., J. Phys. Soc. Japan **51**, 358 (1982) など.
- 3) YONEAWA F. & ODAGAKI T., Solid State Commun. **27**, 1199 (1978).
- 4) TSUJINO K., YAMAMOTO M., TOKUNAGA A. & YONEZAWA F., Journal de Physique **42**, C4-55 (1981).
- 5) COHEN M.H., SINGH J. & YONEZAWA F., Solid State Commun. **27**, 1199 (1978).
- 6) YONEZAWA F. & COHEN M.H., Springer Series in Solid State Sciences **25**, Springer, 119 (1981).
- 7) ODAGAKI T., OGITA N. & MATSUDA H., J. Phys. C ; Solid State Phys. **13**, 189 (1980).
- 8) KIRKPATRICK S. & EGGARTER T.P., Phys. Rev. **B6**, 3598 (1972).