

## バリアブル・レンジ・ホッピング伝導のインピーダンス特性

## Impedance characteristics of variable-range hopping conduction

林 稔晶

日本電信電話株式会社 NTT 物性科学基礎研究所

## 1. 研究目的

本研究はバリアブル・レンジ・ホッピング伝導の伝導メカニズムを明らかにすることを目的としている。ホッピング伝導によって各サイトにおけるキャリアの占有確率が変化するが、それを示す指標として各サイトに局所化学ポテンシャルを定める。この局所化学ポテンシャルの統計分布を調べることによって、パーコレーション理論とは異なるモデルの構築を目指している。

## 2. 研究成果の内容

各サイトの位置とエネルギーがランダムな不規則格子を考える。この格子に電界  $E$  を  $x$  方向にかけたとき、サイトからサイトにキャリアが遷移していく。Miller-Abraham 型の遷移確率を考え、各サイトにおけるレート方程式を建てる。サイトの数が  $N$  ならば、 $N \times N$  の行列を解いて各サイトの電位  $V_i$  を求める。局所化学ポテンシャル  $\mu_i$  は  $V_i - Ex_i$  として定義される。すなわち  $\mu_i$  は電位の揺らぎを表している。

問題を簡単化するためにエネルギーはランダムだが位置は規則的な 3 次元不規則格子を考える。図 1 はこのような不規則格子の  $\mu_i$  の分散  $\sigma^2$  を示している。

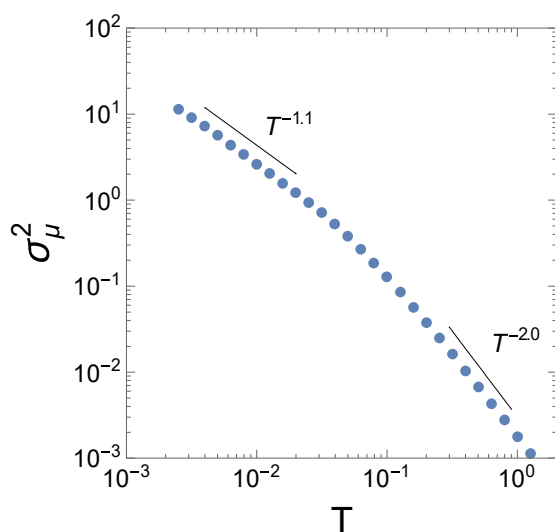


図 1

$\sigma^2$  は高温領域で温度  $T$  の  $-2$  乗に比例するが、低温領域で  $-1.1$  乗に比例することがわかる。高温ではサイトのエネルギーに依存せず、キャリアは電界方向にある最近接のサイトに遷移する。一方、低温では空間的に近いがエネルギー的に不利なサイトよりも、たとえ遠くともエネルギー的に有利なサイトに遷移する。その結果、直流の伝導度は熱活性化型ではなく、Mott 型の温度依存性  $\exp\{-(T_0/T)^{1/4}\}$  を示すことが知られている。このようなバリアブル・レンジ・ホッピング伝導を示す温度領域において  $\mu_i$  の分散

$\sigma^2$ の温度依存性が変化していることを意味する。

次に4次元不規則格子について考える。最近接ホッピング伝導を示す高温領域で、3次元の場合と同様に、 $\sigma^2$ が温度  $T$  の $-2$ 乗に比例する。一方、バリアブル・レンジ・ホッピング伝導を示す低温領域で $-0.8$ 乗に比例することがわかる。すなわち指数が次元依存性を示すことがわかった。

残念ながら2次元の低温領域の温度依存性は現時点ではっきりしていない。すなわち3次元、4次元の場合と異なり、温度のべき関数に従わなかった。この理由として(1)計算サイズが十分に大きくなかったため、(2)桁落ちのため(Lisを用いて64ビット計算を実施している)、(3)2次元では本当にべき関数に従わないなどが考えられる。

### 3. 学際共同利用が果たした役割と意義

不規則格子の端の効果を小さくするため、サイト数  $N$  をできるだけ大きくする必要がある。しかし、 $N$  を大きくすればするほど大きな行列を解く必要が生じる。遷移確率がサイト間距離に対して指数関数的に減衰するので、あるサイトから遷移できるサイトはそのサイトの近傍に限られるとする。近傍の数を  $n$  とすれば、解くべき行列の非ゼロの数は  $n \times N$  となる。よって、 $n$  と  $N$  の両方を調節し、メモリが許す範囲の問題を解くことになる。

スパコンを利用する前は非ゼロの数が  $8 \times 10^7$  くらいが限界だった。しかし、スパコンで256ノード利用することによって倍以上大きな行列を計算できるようになった。このことによって高次元の不規則格子の計算が可能になった。次元による  $\mu_i$  の分布の違いを比べることによって全体の構造があきらかになってきた。

### 4. 今後の展望

まずはレート方程式の数値計算から  $\mu_i$  が本当に低温で温度のべき関数に従うかを確定させたい。その上で2, 3, 4次元の指数をそれぞれ確定させたい。

4次元の結果は有効媒質近似(EMA)を用いてほぼ再現できることが分かった。2次元、3次元ではEMAで高温領域だけ説明がつく。低温領域では4次元の場合と同様に指数が $-0.8$ となり、レート方程式の結果と一致しない。逆に低温領域でEMAからずれるということは、バリアブル・レンジ・ホッピング伝導を示す領域で平均場近似を超えたモデルが必要であることを示唆している。適切なモデルを構築することによって低温領域の振る舞いを理解したい。

現時点では低周波の極限の研究をおこなっているのだが、最終的には全周波数領域に研究を広げていきたい。

### 5. 成果発表

(1) 学術論文

(2) 学会発表

ICPS2020 に投稿したが、コロナウイルス感染拡大のために会議が延期になった。

(3) その他

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus			
Oakforest-PACS	○	50,000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			