

## バリアブル・レンジ・ホッピング伝導における電圧分布の統計

### Statistics of voltage distribution in variable-range hopping

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

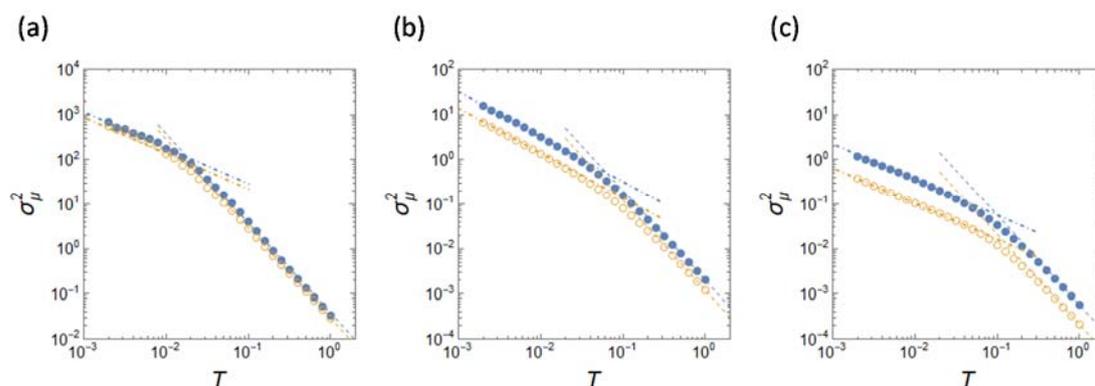
【背景】バンド伝導と異なり、ホッピング伝導はサイト間のキャリアの遷移レートが何桁にも亘り分布している。そのようなホッピング伝導の交流コンダクタンスは、材料の種類（アモルファス有機半導体、アモルファス酸化物半導体など）やキャリアの種類（電子、イオンなど）にかかわらず、同様の周波数依存性を示す。このコンダクタンスの普遍性を示す機構として、従来はパーコレーション理論を基点として説明されてきた。パーコレーション理論では少数の比較的遷移レートの高いパスを通して電流が試料の端から端まで流れると考える。この理論は直流コンダクタンスの温度依存性を見事に再現する。しかし、交流では必ずしもキャリアが端から端まで移動する必要がないので、キャリア・パスのパーコレーションが要請されるわけではない。

【目的】我々は交流も含む、バリアブル・レンジ・ホッピング(VRH)伝導の新しいモデルの構築を目指している。そのための第一段階として我々は低周波極限のキャパシタンスに注目し研究を実施している。新しいモデルを構築するためには絶対零度近傍のより詳細な情報が必要である。しかし、低温における低周波極限の実験は非常に難しい。そこで大規模数値計算から得られる情報は非常に重要である。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の電位揺らぎ $\mu$ を定める。電位揺らぎの分散が温度のべき乗で変化し、絶対零度に向かって温度減少とともに増加することを、今までに数値計算から明らかにしてきた。また、電位揺らぎの相関長も温度に対してべき乗則で変化することがわかった。これらのことは、ホッピング伝導が臨界現象であると示唆している。臨界現象では空間次元が非常に重要である。数値計算で次元性を明らかにすることはモデル構築にとって非常に重要であると思われる。

#### 2. 研究成果の内容

我々は2018年度まではデスクトップ型のWindows PCでMathematicaを用いてホッピング伝導の数値計算をおこなっていた。2次元不規則格子上的計算で電位揺らぎ $\mu$ の分散の温度依存性は全領域で $T^{-2}$ であるとわかった。2019年度から学際共同利用を通して大規模計算を実施できるようになった。その結果、高温では従来の主張通り $T^{-2}$ であることが確認できた。一方、VRH伝導が顕著になる低温では2次元の $\mu$ の分散は一定値に漸近する。すなわち、規模の小さい計算結果は間違っていることがわかった。 $\mu$ の分散の低温での振る舞

いは次元性があり、3次元の $\mu$ の分散は $T^{-1}$ となることが分かった。2020年度は4次元の計算を実施した。4次元の $\mu$ の分散は低温で $T^{-0.8}$ に比例することが分かった。これらの成果を論文にまとめて PhysicaB に投稿したが、残念ながら不受理となった。今後、実験結果を加えるなどして再投稿を予定している。



電位揺らぎ $\mu$ の分散の温度依存性。各図はそれぞれ(a) 2次元、(b) 3次元、(c) 4次元格子の場合を示している。 $\alpha$ が局在サイトの波動関数の広がりを表すパラメータとすると、●は $\alpha = 0.4$ を、○は $\alpha = 0.8$ の場合を示している。

また、有効媒質近似(EMA)という平均場近似を用いて $\mu$ の分散を計算した。高温ではレート方程式の結果と同じで $T^{-2}$ に比例する。一方、低温では各次元ともレート方程式と異なる結果を示している。この議論は一部秋の物理学会で発表した。今後の発展を見据え、現在はEMAを基に回路内で発生するジュール熱の総和について検討している。

### 3. 学際共同利用が果たした役割と意義

臨界現象では秩序パラメータ(本研究では電位揺らぎ $\mu$ がそれに相当すると考えている)に空間的な相関が存在する。計算に用いる格子のサイズが相関長と同程度の場合、その計算は臨界現象を正しく反映することができない。この相関長は臨界点に近づくにつれ温度のべき乗で増加していくと予想されるので、臨界点近傍(すなわち絶対零度)の振る舞いを正しく認識するためには非常に大きなサイズの格子を計算に用いる必要がある。

ところが、格子サイズを大きくすれば大きくするほど計算に必要なメモリーが大きくなる。レート方程式に現れるコンダクタンス行列の大きさは(格子内のサイト数)<sup>2</sup>である。しかし、遠く離れたサイト間のコンダクタンスは無視できることから、この行列は疎行列になっている。行列内に現れる非ゼロの数は(格子内のサイト数) × (近接点数)で表される。(格子内のサイト数)は上記の理由によりできるだけ大きく取りたい。一方、バリアブル・ホッピング伝導(VRH)では低温になるにつれキャリアのホッピング距離が長くなるので、(近接点数)も犠牲にできない。さらに、低温になるにつれサイト間のコンダクタンスのばらつきが大きくなるため、倍精度を超えたより高い精度の計算が必要となり、メモリー使用量が

増加する。よって、絶対零度における VRH の振る舞いを正しく理解するためには計算に必要な最大使用メモリーが大きくなる。このため、スーパーコンピューター無くしてこの研究の継続は難しく、学際共同利用の意義は大きい。

#### 4. 今後の展望

2021 年度はより多くの不規則格子についてレート方程式を解き、 $\mu$  の power spectrum の configurational average を取りたいと考えている。上で求めた分散は不規則格子の依存性は生じないが、 $\mu$  の power spectrum は格子依存性がある。configurational average を取ることによって VRH 伝導における  $\mu$  の power spectrum を求めたい。それを EMA から用いた  $\mu$  の power spectrum と比べることによって、平均場近似に何が足りないかを検討し、を高次の摂動の計算に生かしたいと考えている。また、余裕があれば低周波から高周波までの全ての周波数領域で計算を実施したい。

#### 5. 成果発表

##### (1) 学術論文

Physica B に投稿したが不受理になった

##### (2) 学会発表

林 稔晶、都倉 康弘、藤原 聡、西口 克彦、8aD1-8, 日本物理学会 2020 年秋季大会

##### (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	○	192,000	96,000
※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。			