

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

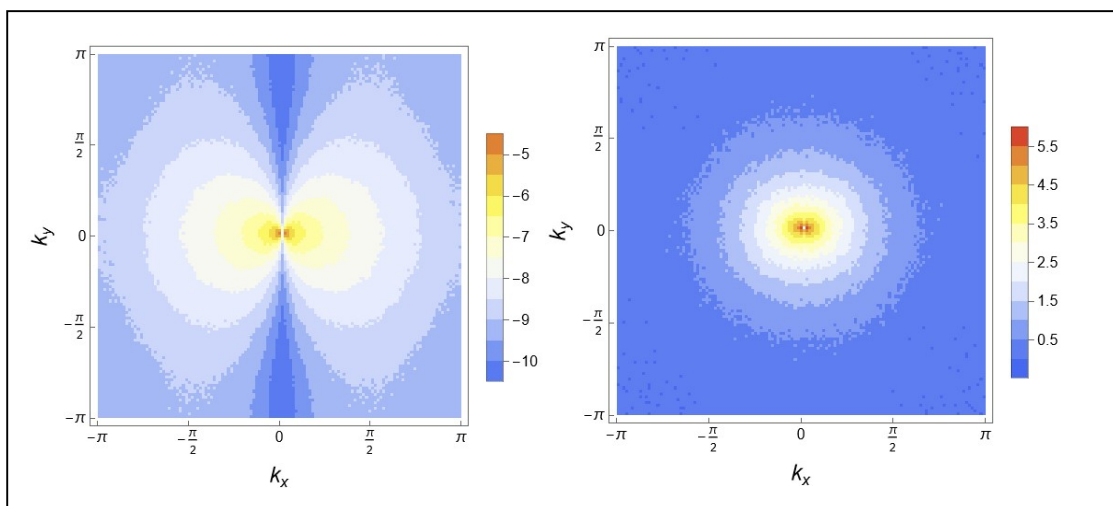
1. 研究目的

【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。一方、交流ではキャリアが端から端まで必ずしも移動する必要がないので、従来のパーコレーション理論では上手く説明することができない。

【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。アモルファス・シリコンを用いた実験と大規模数値計算を両輪として、低周波極限のキャパシタンスの温度依存性を示してきた。伝導によって各サイトにおけるキャリアの占有確率が増加するが、それを示す指標として各サイトの電位揺らぎ μ を定める。今期は μ のパワースペクトル、およびそこから得られる相関長を見積もり、解析することを目標とした。

2. 研究成果の内容

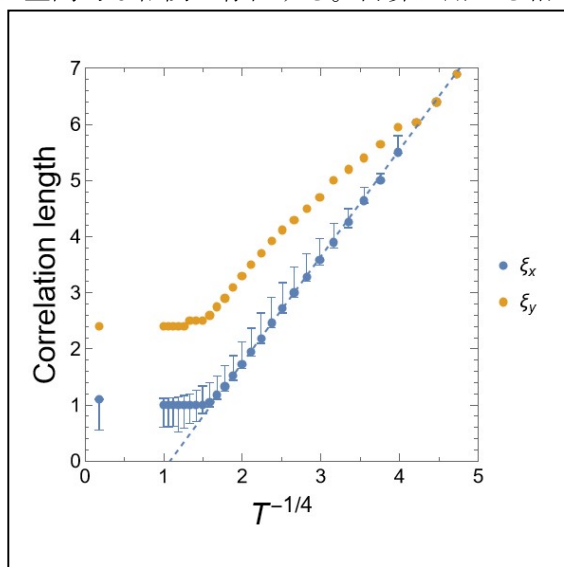
電界が x 方向に印加されているとして、レート方程式から μ を見積もった。図 1 は μ の



パワースペクトルの等高線図を示している。左図が高温の場合、右図が低温の場合に相当する。高温では電界に平行な方向と垂直な方向の間で異方性が大きいことがわかる。これはキャリアが主に電界に平行に移動することができるからである。一方、バリアブル・レンジ・ホッピング伝導が顕著になる低温では異方性が抑制されている。原点付近で非常に大きなピークを持ち、 $1/\{c_1 k_x^2 + c_2 k_y^2 + c_2 k_z^2\}$ に比例している。パワースペクトルを逆フーリエ変換することによって相関関数を得ることができる。原点付近の緩和長を相関長と見なすことによって相関長の温度依存性を見積もった(図 2)。計算規模の制約によってエラーバーが生じているが、電界に平行な方向の相関長が $T^{-1/4}$ に比例していることがわかる。また、垂直な方向の相関長も低温では $T^{-1/4}$ に比例している。この温度指数は、バリアブル・レンジ・ホッピング伝導の特徴である Mott の関係に現れる温度指数と一致している。このことから低温で μ の長距離秩序が形成され、それがバリアブル・レンジ・ホッピング伝導と関係があると推察される。今後は μ の長距離秩序を基にバリアブル・レンジ・ホッピング伝導のモデルを構築していきたい。

3. 学際共同利用プログラム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 μ 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)²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) x (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かった。

4. 今後の展望

数値計算によって実験では得ることができなかった μ の多くの情報を得ることができた。これらの知見に基づいてバリアブル・レンジ・ホッピング伝導の新しいモデルの構築を目指す。イジングモデルやスピングラスなどの臨界現象の類推を生かして統計力学的な手法の開発を目指す。

5. 成果発表

(1) 学術論文

T. Hayashi, Y. Tokura, and K. Nishiguchi, *J. Phys. Soc. Jpn.* 92, 034001 (2023).

(2) 学会発表

林 稔晶、都倉 康弘、西口 克彦、14aH112-1、日本物理学会 2022 年秋季大会

林 稔晶、都倉 康弘、西口 克彦、24aL3-10、日本物理学会 2023 年春季大会

(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			
Wisteria/BDEC-01	○	116,875	0
※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。			