

モット転移の理論的研究

発表者 中村 哲郎

指導教員 梯 祥郎

固体は金属と絶縁体(半導体)に分類することができる。固体内電子のエネルギー固有状態を求め、パウリの原理に従ってそれらの状態に電子を詰めるバンド理論は多くの金属の電子状態を明らかにし、単純金属や半導体、さらにイオン結晶の絶縁性を説明することができた。しかし、NiOなどの絶縁体酸化物をバンド理論で解析すると、フェルミレベルが Ni^{2+} のdバンドにかかっており、軌道数が5個あるのでこれらのバンドは通常重なって金属状態になる。実際には高温まで絶縁体であるので、このような系ではバンド理論が破綻する。このようにバンド理論で説明できない物質は他にも多く見出されている。この問題に対して、MottとPeierlsはバンド理論が電子間クーロン相互作用を無視しているために矛盾が生じるのだという考えを示した。このように電子間クーロン相互作用によって生じる絶縁体をモット絶縁体、バンド占有によって生じる絶縁体をバンド絶縁体という。

本研究では、モット絶縁体が電子相関によってどのように生成されるかを最も簡単なモデルであるハバードモデルとグリーン関数法を用いて明らかにしたい。具体的には、原子あたり1個の電子がある場合を考え、2体相互作用を合金近似とコヒーレントポテンシャル近似(CPA)を用いて有効媒質に対する自己無撞着方程式(CPA方程式)を導く。この方程式をクーロン相互作用が弱い領域と強い領域で解析的に解いて、モット絶縁体の発現の仕組みを1粒子状態密度の観点から明らかにしていく。

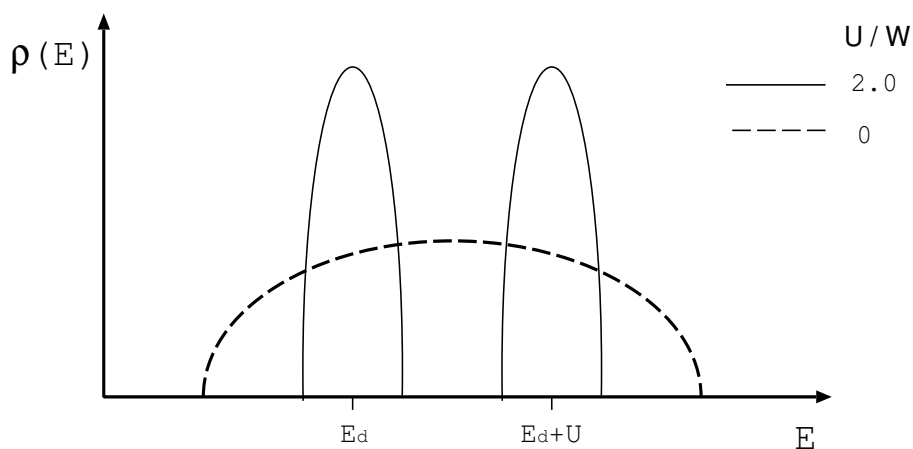


Fig.1 Density of states for electrons. E_d , W , and U denote atomic level for d electrons, band width, and intra-atomic Coulomb interaction parameter, respectively.