

# 金属非金属の相転移

## 1 はじめに

本ポスターでは**金属非金属の相転移**に焦点を当てて

1. バンドと金属絶縁体の転移
2. 超伝導体の転移
3. Mott 転移と動的平均場理論

の概要を説明しようと思います。ほとんどの部分が説明不足なので詳しくは各文献を参照してください。

## 2 物質の分類とバンド構造、状態密度 (準備)

### 2.1 物質の分類

金属と非金属の分類は物質の**電気伝導度**  $\sigma$  の違いによります。  $\sigma$  は、

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

のように電場  $\mathbf{E}$  に対する電流  $\mathbf{j}$  の応答係数です。一般には  $\sigma$  の振る舞いで金属非金属の分類ができます。<sup>\*1</sup>

### 2.2 バンド構造

固体中の電子の性質の多くは**バンド構造**を見ることで理解できます。

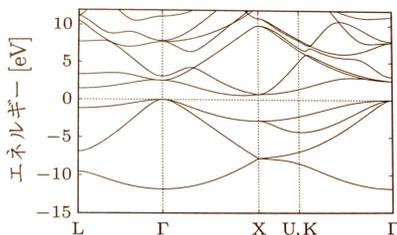


図 1: バンド図の例。[1] より引用。図は Si 結晶のバンド図です。

バンドは波数表示のシュレーディンガー方程式、

$$\left( \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \varepsilon_{\mathbf{k},n} \right) c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0 \quad (2)$$

の解  $\varepsilon_{\mathbf{k},n}$  を図示したもので、**エネルギー準位**を表しています。

### 2.3 Green 関数とスペクトル

クーロン相互作用影響が強い系などでは**一粒子 Green 関数**  $G_{\alpha,\alpha'}$  や**一粒子スペクトル関数**  $A_{\alpha}(\omega)$  というものを考えることがあります。<sup>\*2</sup>

#### 2.3.1 一粒子遅延 Green 関数

一粒子遅延 Green 関数は以下のように定義されます。<sup>\*3</sup>

$$G_{\alpha,\alpha'}^R(t-t') = -i \langle \{ c_{\alpha}(t), c_{\alpha'}^{\dagger}(t') \} \rangle \quad (3)$$

ただし、 $t > t'$  です。遅延グリーン関数は時刻  $t'$  に準位  $\alpha'$  の粒子を生成してから時刻  $t$  に準位  $\alpha$  に粒子が伝播する遷移振幅の熱平均を表すこととなります。

#### 2.3.2 一粒子スペクトル関数

一粒子スペクトル関数  $A_{\alpha}(\omega)$  は一粒子遅延グリーン関数のフーリエ変換の虚部を取ることで定義されます。<sup>\*4</sup>

$$A_{\alpha}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{G}_{\alpha,\alpha}^R(\omega) \quad (4)$$

各  $A_{\alpha}(\omega)$  を得たのち、 $\alpha$  について和を取ると**一粒子状態密度**  $D(\varepsilon)$  を得ます:

$$D(\varepsilon) = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \left( \frac{\varepsilon}{\hbar} \right) \quad (5)$$

この状態密度が有限の値を持つ時にはその付近にエネルギー準位が存在すると一般に言えます。

### 2.4 Bloch-Wilson の理論

絶対零度下で電流が流れるか否かを判定するには、先程紹介したバンドや状態密度と**フェルミエネルギー**  $\varepsilon_F$  の位置関係を用いることができます。

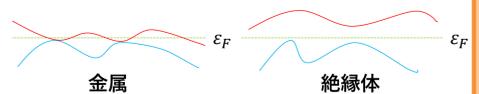


図 2: 金属と絶縁体のバンドの様子。  $\varepsilon_F$  とバンドの交差が系の状態を決めます。

絶対零度ではフェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  まで電子が詰まっており、左図のように  $\varepsilon_F$  がバンドや状態密度と交差する場合は金属、ギャップの中に存在する場合には絶縁体となります。

## 3 金属と絶縁体の転移

### 3.1 Bloch-Wilson 転移

原子軌道から出発して軌道を重ねて新しい軌道を作ることを考えます<sup>\*5</sup>。

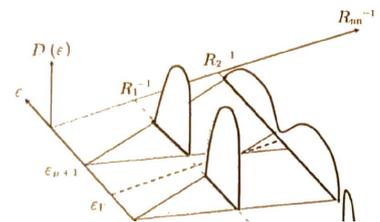


図 3: バンド交差の様子。[3] より引用。原子間距離を近くするとバンドが重なって金属化しています。

<sup>\*1</sup> 有限温度で金属と絶縁体を判断するには  $\sigma$  の温度依存性が用いられますが、今回は後述する Bloch-Wilson の理論というものを uses。

<sup>\*2</sup> 先程までのバンド理論ではクーロン相互作用は無視していました。

<sup>\*3</sup>  $\langle \dots \rangle$  は熱平均を表し、 $c_{\alpha}(t), c_{\alpha'}^{\dagger}(t')$  は各時刻の生成消滅演算子です。また、 $\{ c_{\alpha}(t), c_{\alpha'}^{\dagger}(t') \} = c_{\alpha}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t') + c_{\alpha'}^{\dagger}(t') c_{\alpha}(t)$  です。

<sup>\*4</sup> なお、**レーマン表示**というものを見るとスペクトル関数の意味が理解しやすいです。

<sup>\*5</sup> **強結合近似**と呼ばれます。

図のように原子間距離を変化させることで生じるバンドの幅を変えることができ、バンドに重なりを生じさせて絶縁体から金属への転移が生じることがわかります。(Bloch-Wilson 転移)。

### 3.2 Peierls 転移

今度は結晶周期の変化により生じる相転移について述べます。周期  $a$  の一次元系を考えます。

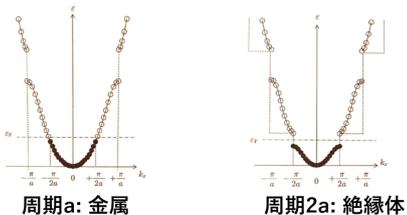


図 4: 周期の変化による安定化で  $\varepsilon_F$  付近にギャップが生じる様子。[3] より引用。

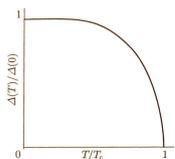


図 5: Peierls 転移で生じるギャップの温度依存性。  $T = T_C$  でギャップは消えて金属になります。[3] より引用。

周期変化によりギャップができることでエネルギー的に得をして、相転移が起きます。また、次元が大きくなると Peierls 転移は起こらなくなります。<sup>\*6</sup>

## 4 金属と超伝導の転移

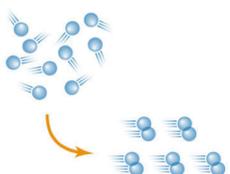


図 6: クーパー対の様子。[2] より。

Peierls 転移では周期変化によりギャップが生成しましたが、超伝導転移ではクーパー対の凝縮による利得でギャップが生じます。

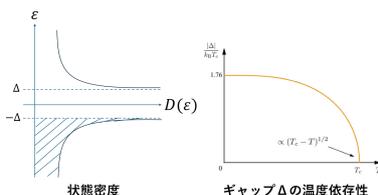


図 7: BCS 理論における状態密度およびギャップ  $\Delta$  の温度依存性。温度依存性の図は [2] より引用。

ギャップが生じるという点で超伝導体と絶縁体は似ていますが、前者では電流が流れます(超伝導電流)。<sup>\*7</sup>

## 5 Mott 転移

### 5.1 Hubbard 模型と Mott 転移

強相関係では別の機構による金属絶縁体転移が起こります(Mott 転移)。相互作用  $U$ <sup>\*8</sup>を導入した Hubbard 模型と呼ばれる模型を考えます。

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (6)$$

$U$  を導入したことで各サイトに局在の可能性が生まれます(下図)。

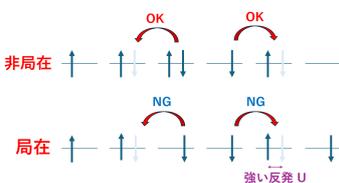


図 8: クーロン力  $U$  による局在化のイメージ。  $U$  により各サイトに一つの電子が局在する。

つまり  $U$  が大きいと電子の移動が禁止され、電流が流れなくなり絶縁化します。

### 5.2 動的平均場理論と Mott 転移

次に状態密度を見てみましょう。2章で述べた通り状態密度を得るには一粒子 Green 関数を計算します。これをうまく計算する近似法に動的平均場理論<sup>\*9</sup>というものが存在します。

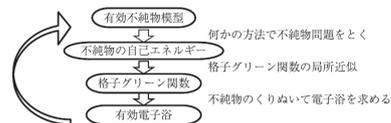


図 9: 自己無撞着ループの流れ。[4] より。

動的平均場理論の計算では、有効不純物モデルの Green 関数  $G_0$  の自己無撞着方程式を解きます(上図)。

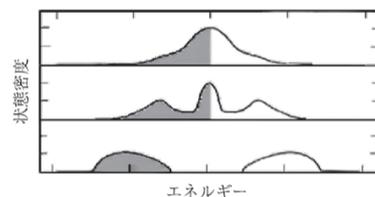


図 10: 量子モンテカルロ法による状態密度の計算結果。[4] より引用。下に行くほど  $U$  が大きい。  $U$  を大きくすることで局在化して絶縁化しています。

上図の計算結果から、  $U$  の増加により絶縁化していることがわかります。

### 参考文献

- [1] 加藤岳生. 一歩進んだ理解を目指す物性物理学講義. SGC ライブラリ. サイエンス社, 2022.
- [2] 楠瀬博明. 基礎からの超伝導. 講談社, 2022.
- [3] 米沢富美子. 金属-非金属転移の物理. 朝倉書店, 2012.
- [4] 藤本聡 and 川上則雄. 量子多体系の物理. SGC ライブラリ. サイエンス社, 2011.

<sup>\*6</sup> フェルミ面全体にエネルギーギャップを生じさせることが難しくなるからです。実際、Peierls 転移は異方性が大きい一次元的な系で観測されます。  
<sup>\*7</sup> またギャップの存在により、超伝導体は散乱が起こらないので抵抗が 0 となります。  
<sup>\*8</sup> クーロン相互作用  $U$  は同じ位置(サイト)に電子が存在するときにエネルギー損失を与えます。  
<sup>\*9</sup> 動的平均場理論は系を(無限次元で厳密な)有効不純物模型に帰着し、そこから伝導電子の Green 関数や自己エネルギーを計算する方法です。詳しくは [4] を参照してください