

例題 0.1: Mott insulator

Coulomb 力が強い 4 つのサイトに電子を 4 つ入れる． $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ と $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ のどちらが基底状態としてふさわしいだろうか．サイト間の電子の飛び移りを摂動として扱う．ここで重要なのは，基底状態のエネルギーは 2 次摂動により必ず下がるということである． $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ に摂動を加えたとしても Pauli の排他律により電子の飛び移りは起こらない．摂動によってエネルギーは変化しない．しかし， $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ は電子が反平行であるため電子のサイト間での飛び移りが許される．これは，2 次摂動によるエネルギーの低下を引き起こす．よって， $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ の方が基底状態としてふさわしい^{abc}．基底状態の様子を次の図に示す．

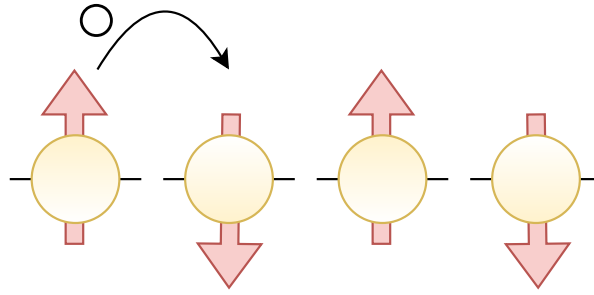


図 1: 反平行のとき

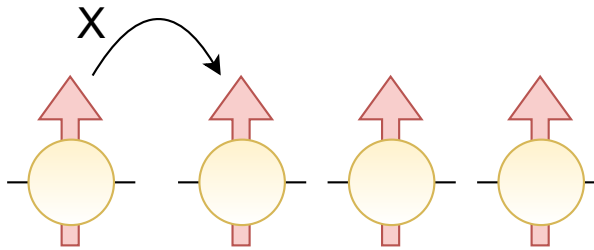


図 2: 平行のとき

^aNevill Francis Mott (1905-1996)

^bMott insulator は反強磁絶縁体である．

^cバンドギャップが大きくギャップ内にフェルミ準位があるバンド絶縁体と異なり，運動エネルギーが小さく Coulomb 力が大きいため電子が移動できない絶縁体である．

^d $RNiO_3$, TaS_2 , Sr_2IrO_4 など