

Глава заканчивается параграфом, посвященным механизму переноса в полярных твердых телах. Там мы увидим, что, помимо зонной проводимости, может иметь место *перескакивание* электрона или полярона из одного локализованного состояния в другое.

## § 8. Корреляции, модель Хаббарда

Исследуем прежде всего два примера, в которых корреляция между электронами, несомненно, играет определяющую роль.

Рассмотрим одновалентный металл. Каждый атом решетки приносит с собой один валентный электрон ( $s$ -электрон). Валентная зона тогда заполнена наполовину. Ради простоты пренебрегаем возможностью перекрытия зон. Заполненные и незаполненные состояния в  $s$ -зоне перекрывают друг к другу. Валентные электроны локализованы и свободно перемещаются по кристаллу. Что касается зонной модели, то это все, что надо знать для объяснения металлических свойств кристалла.

Увеличим теперь постоянную решетки, одновременно, однако, сохраняя кристаллическую структуру, т. е. относительное расположение ионов решетки. Результатом будет уменьшение ширины  $s$ -зоны. Если увеличить постоянную решетки до такой величины, что взаимодействие между атомами решетки будет практически отсутствовать, зона сведется к дискретным  $s$ -уровням изолированного атома. Предварительно это уже обсуждалось в ч. I, § 23 (рис. 29а, ч. I). В предельном случае изолированных атомов, однако, каждый атом, конечно, нейтрален, т. е. он имеет вблизи себя *локализованным* один из валентных электронов. Металлическая проводимость теперь невозможна, хотя, согласно приближению зонной модели, мы все еще имеем полузаполненную зону. Приближение зонной модели, таким образом, рушится для узких зон. Локализация электронов на атомах решетки означает корреляцию между электронами. Для узких зон также корреляции следует учитывать.

Подобное явление находим во взаимодействующем электронном газе (модель желе). С убыванием концентрации электронов (увеличение среднего расстояния между электронами  $r_s$ ) вклад кинетической энергии в (1.42) (первый член в правой части) убывает по сравнению с вкладом потенциальной энергии (второй член в правой части). Когда второй член сильно преобладает, оказывается, что в состоянии наименьшей энергии электроны организованы в кристаллоподобную совокупность, т. е. электроны самоорганизуются таким образом, чтобы быть как можно дальше друг от друга. Это тоже означает локализацию электронов из-за корреляционных эффектов (кристаллизация Вигнера).

Оба приведенных здесь эксперимента являются умозрительными; они показывают, какое влияние могут оказывать корреляции на утверждения, полученные на основании одноэлектронного приближения. С целью количественной формулировки проблемы на-