

Этот LCAO-метод, в качестве *блоховского приближения сильно связанных электронов*, полезен для понимания возникновения энергетических зон вследствие расщепления дискретных атомных термов в твердом теле. В гл. IV ч. I мы ограничили себя исходящим из противоположной предпосылки (бриллюэновским) приближением почти свободных электронов.

Вернемся теперь к обсуждению параметров T_0 , T_1 и U . В приближении узких зон, согласно (1.51) и (1.55), получаем

$$T_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k \left[E^{at} + C + \sum_{\text{по б.с.}} A(\mathbf{R}_i) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i) \right] \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)]. \quad (1.56)$$

Возникающие суммы относятся к типу $(1/N) \sum_k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) = \delta_{\mathbf{R},0}$.

Следовательно,

$$T_{ij} = (E^{at} + C) \delta_{ij} + \sum_{\text{по б.с.}} A(\mathbf{R}_i) \delta_{i+l,j}. \quad (1.57)$$

Таким образом, $T_0 = T_{ii}$ является средней энергией зоны; $T_1 = T_{ik}$ (i, k — ближайшие соседи) равна половине ширины зоны.

Смысл параметра U следует из рассмотрения предельного случая бесконечно большой постоянной решетки. Очевидно, что тогда $T_1 = 0$ и гамильтониан становится диагональным. Энергия приобретает вид

$$E = \sum_i [T_0(n_{i\sigma} + n_{i,-\sigma}) + Un_{i\sigma}n_{i,-\sigma}] = N_1T_0 + N_2(2T_0 + U), \quad (1.58)$$

где N_1 — число узлов решетки, каждый из которых занят одним электроном, а N_2 — число узлов решетки, занятых двумя электронами. T_0 есть поэтому энергия, необходимая, чтобы связать электрон в изолированном атоме. $T_0 + U$ есть энергия, необходимая для присоединения второго электрона с противоположно направленным спином. Величина U , следовательно, представляет собой энергию кулоновского взаимодействия двух электронов, находящихся в одном и том же атоме.

В основном состоянии N имеющих электронов обладают энергией T_0 , т. е. в каждом атоме размещено по одному электрону ($N_1 = N$, $N_2 = 0$). В этом предельном случае имеет место, следовательно, строгая локализация электронов. Приближение Хаббарда приводит, таким образом, от зонной модели к локальному описанию.

Рассмотрим теперь основное состояние системы с конечной постоянной решетки, в котором каждый атом решетки обладает одним электроном. Направление спина выбрано меняющимся от соседа к соседу (антиферромагнитное основное состояние). Если ввести в эту систему дополнительный электрон с заданным спином, он мо-