

жет быть размещен у одного из $N/2$ атомов, которые уже обладают электроном с противоположно направленным спином. Принцип Паули запрещает его размещение вместе с любым из других $N/2$ атомов. Энергия этого электрона равна $T_0 + U$ в случае изолированных атомов [см. (1.58)]. Вследствие взаимодействия между всеми $N/2$

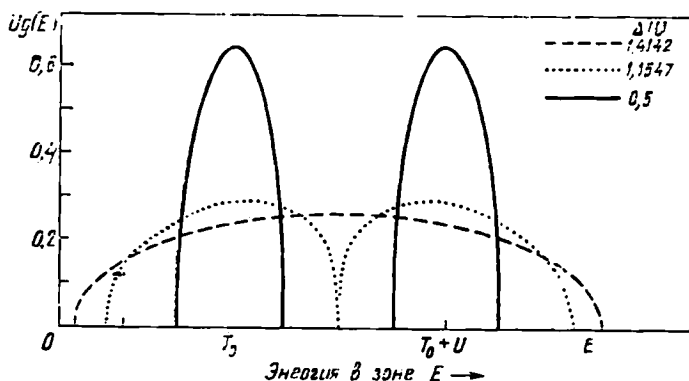


Рис. 11. Расщепление зоны за счет электрон-электронного взаимодействия в модели Хаббарда. $g(E)$ — плотность состояний, Δ — ширина зоны в зонной модели (корреляции отсутствуют), U — эффективное кулоновское отталкивание двух электронов у одного и того же иона. [По Хаббарду (Proc. Roy. Soc., 1965, v. A281, p. 401).]

состояниями, которые может занимать электрон, эта энергия расщепляется в зону, центрированную относительно $T_0 + U$. Аналогичные аргументы приводят к расщеплению энергии T_0 в соответствующую зону. Пока ширины этих зон меньше расстояния $(T_0 + U) - T_0 = U$, между обеими зонами будет щель. При критической ве-

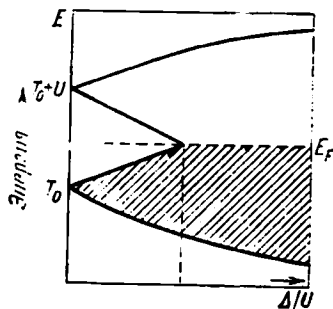


Рис. 12. Переход от локализованных состояний к делокализованным в (полузаполненной) энергетической зоне в модели Хаббарда (ср. с рис. 11). T_0 — энергия, необходимая для связывания электрона на свободном ионе, $T_0 + U$ — энергия, необходимая для связывания второго электрона на том же ионе.

личине расщепления (определяемой постоянной решетки) щель исчезает. В таком случае имеет место переход от локализованного описания к зонной модели.

Этот результат может быть выведен количественно из гамильтониана (1.54). Вычисления, однако, слишком длинны для того,