

чтобы воспроизводить их здесь. Вместо этого ссылаемся на обзорную статью Адлера [101.21] и оригинальную работу Хаббарда, там цитируемую. В примере, рассмотренном здесь (полузаполненная s -зона, антиферромагнитное основное состояние), находим, предполагая простую плотность состояний, поведение, показанное на рис. 11 и 12. В зависимости от отношения Δ/U (ширина зоны в зонной модели без корреляций/эффективное кулоновское отталкивание электронной пары у иона) s -зона расщепляется на две отдельные зоны или только изменяет свою плотность состояний. В основном состоянии занята нижняя половина состояний. Таким образом, выше мы смогли качественно показать переход в твердом теле от «металлического» поведения к «изотропному».

В отношении количественного обсуждения приближения Хаббарда, возможностей его обобщения и его слабых мест снова отсылаем к статье Адлера в [101.21], наряду с ней — к статьям Доннаха [111a.18], Мотта и Зайнамона [111c. 21] и сообщениям в [125].

§ 9. Переходы металл — изолятор

В § 7 мы упоминали, что большая группа соединений переходных металлов предоставляет многочисленные примеры твердых тел, которые нельзя адекватно описать с помощью зонной модели. В этой группе находим как металлы, так и изоляторы.

Кроме того, эта группа дает также примеры другого важного явления: с увеличением температуры у ряда соединений наблюдается скачок проводимости, который может достигать многих порядков величины. Возможное объяснение состоит в том, что с увеличением температуры величина постоянной решетки переходит через пороговое значение, при котором локализованные электроны становятся делокализованными, т. е. две зоны Хаббарда на рис. 12 сливаются. Выдвинутый Моттом аргумент, который мы теперь развиваем, показывает, что подобный переход может приводить к резкому увеличению проводимости.

Если в антиферромагнитном основном состоянии, которое рассматривалось в предыдущем параграфе, перевести электрон от его иона решетки к другому, то это означает в модели Хаббарда образование свободного электрона в верхней зоне и свободной дырки в нижней (заполненной) зоне. Взаимодействие между этими частицами осуществляется посредством потенциала $V = -e^2/\epsilon r$, где ϵ — диэлектрическая проницаемость решетки. Этот потенциал является дальнедействующим. Электрон и дырка могут образовать связанное состояние (экситон). Несмотря на возбуждение электрона, кристалл остается изолятором. (Следовало бы заметить, что эта аргументация выходит за рамки модели Хаббарда, включающей в себя только взаимодействия в пределах иона решетки.) Если возбуждается много электронов, то образующийся электронный газ