

# 1. 近藤效应和 Hubbard 能带

近藤效应：自从 1930 年以来，实验上发现某些掺有磁性杂质原子的非磁性金属（例如，以铜、金、银等为基，掺入杂质铬、锰、铁等的稀固溶体）的电阻-温度曲线在低温下出现一个极小值。按照通常的电阻理论（见固体的导电性），稀固溶体的电阻应随温度下降而单调下降，最后趋于由杂质散射决定的剩余电阻，因此，难以理解上述现象。1964 年，近藤淳对这个现象作了正确的解释，因此人们常把它称作近藤效应。

Hubbard 能带：

接下来我们从物理图像上具体看一下是怎么影响的，这个系统中共有 16 个格点，16 个电子。填充数为 1。

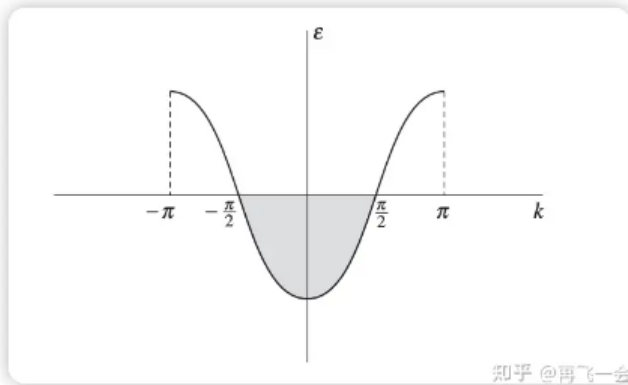


再飞一会

+ 关注

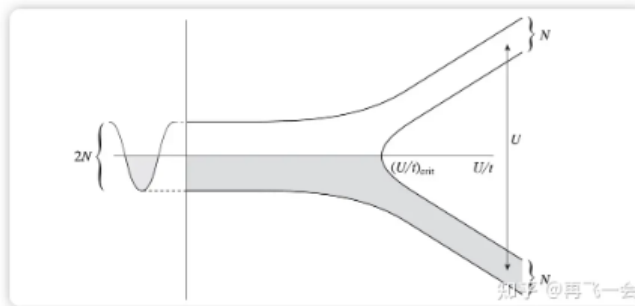
12 人赞同了该回答

对于晶体中的近自由电子<sup>Q</sup>，其哈密顿量<sup>Q</sup>为： $H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$  我们做傅立叶变换<sup>Q</sup>对角化可以得到  $H_k = \sum_{\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  其中  $\epsilon(\vec{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$  在粒子数与格点数相同时，其能带填充如图所示

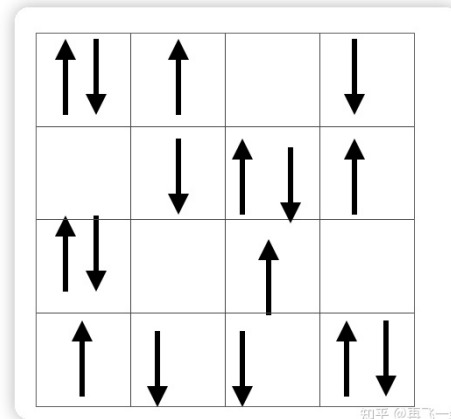


如果我们考虑电子的相互作用，哈密顿量就变成了我们熟悉的 Hubbard 模型

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

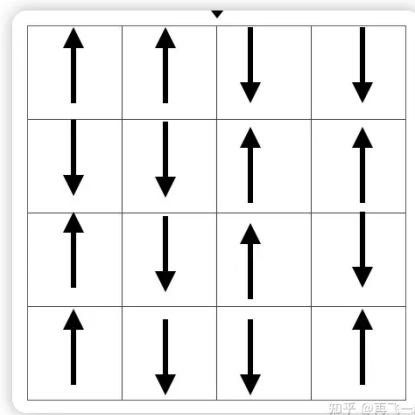


考虑电子之间的相互作用  $U$  之后，原来的能带从中间劈裂，产生一个大小为  $U$  的能隙，将能带分为了上 Hubbard 带和下 Hubbard 带。



知乎 @再飞一会

当电子之间没有相互作用时，这 16 个电子在遵循泡利不相容原理<sup>Q</sup>的前提下随机分布，因此共有 4 个空态，四个双占据态，八个单占据态，此时电子可以随意移动，因此根据能带理论<sup>Q</sup>我们得出此时的系统是导体。当考虑电子之间的相互作用之后，因为双占据态的能量比单占据和空态的能量要高  $U$ ，所以系统的基本此时不倾向于出现双占据态。



知乎 @再飞一会

Mott 绝缘体的基本是反铁磁，这只是为了表达方便所以让他随机分布，后面如果有关注我再解释反铁磁的原因。

我们可以看到 16 个电子随机分布在十六个格点上形成了 16 个单占据态。此时，电子想要从一个格点移动到另外一个格点需要大小为  $U$  的能量，这也就对应了我们上一个图中展示的上 Hubbard 带和下 Hubbard 带之间的能隙。因此此时的系统是绝缘体。这就是 Mott 绝缘体的机理。

$t$  决定了电子移动可以让系统能量变小， $U$  则决定了电子移动时产生的双占据会使系统能量增加多少。系统最终会处于能量最低的状态，所以  $t$  和  $U$  像天平的两端， $t$  大就是导体， $U$  大就是绝缘体。

发布于 2022-05-25 21:29

赞同 12

添加评论

分享

收藏

喜欢

收起

来源：<https://www.zhihu.com/question/330813683>