



# МОТТОВСКИЕ ДИЭЛЕКТРИКИ

Авторы: Д. И. Хомский

---

МОТТОВСКИЕ ДИЭЛЕКТРИКИ, кристаллы с диэлектрич. свойствами, происхождение которых связано не с влиянием периодич. поля кристаллич. решётки, как в обычных диэлектриках или полупроводниках типа

Ge и

Si, а с сильным межэлектронным взаимодействием. Это состояние реализуется, если характерная энергия межэлектронного (кулоновского) взаимодействия

$$U = e^2/r$$

$r$  – ср. расстояние между электронами,

$e$  – заряд электрона) больше ср. кинетич. энергии электронов, мерой которой является ширина разрешённой зоны

$$W = \hbar^2/(mr^2)$$

$m$  – эффективная масса электрона,

$\hbar$  – постоянная Планка). При

$U < W$  применима зонная теория твёрдого тела. При

$U > W$  зона может быть заполнена электронами частично, как в металлах, однако движению электронов, необходимому для переноса заряда, мешают др. электроны, находящиеся на соседних атомах. Своим отталкиванием они «запирают» (локализуют) каждый электрон на своём атоме и делают вещество диэлектриком. Такой механизм локализации предложен Н. Ф. [Моттом](#) и Р. [Пайерлсом](#) в 1937.

Другая трактовка М. д. основана на использовании дискретной модели, описывающей электроны, перемещающиеся с узла

$j$  на узел

$i$  кристалла (с матричным элементом перехода

$t$ ) при отталкивании двух электронов на одном узле (модель Хаббарда, 1963). При этом ширина электронной зоны

$W \sim t$ . Если в системе имеется один электрон на узел и  $W > U$ , то вещество будет металлом с наполовину заполненной зоной. Однако при сильном взаимодействии ( $U > W$ ) в осн. состоянии электроны локализованы на своих атомах и вещество оказывается М. д. Чтобы создать в такой системе подвижные носители заряда, надо «пересадить» электрон со «своего» узла на другой, на котором уже есть электрон. Для этого надо затратить энергию  $\sim U$ , а выигрыш в энергии за счёт делокализации получившихся дырки и лишнего электрона  $\sim W$ , поэтому при  $U > W$  это невыгодно. Вещество остаётся диэлектриком с энергетич. щелью  $\sim (U - W)$  (т. н. щель Мотта – Хаббарда), хотя с точки зрения зонной теории оно должно быть металлом.

К М. д. принадлежат мн. соединения переходных и редкоземельных металлов с частично заполненными внутренними

$d$ - или

$f$ -оболочками, в частности купраты, в которых при легировании обнаружена высокотемпературная сверхпроводимость (см. [Высокотемпературные сверхпроводники](#)). В силу малого радиуса

$d$ - и

$f$ -орбиталей их перекрытие и матричный элемент перехода малы, и для них легко выполняется условие

$U > W$ . В М. д. на атомах имеются локализованные электроны, т. е. локализованные магнитные моменты, соответственно подобные вещества обычно обладают магнитным упорядочением, как правило антиферромагнитным, обусловленным косвенным обменным взаимодействием. При изменении внешних условий (давления, темп-ры, состава соединения) в М. д. может произойти переход в металлич. состояние (см. [Переход металл – диэлектрик](#)), который может сопровождаться изменениями кристаллич. структуры и исчезновением магнитного упорядочения.

Состоянием, родственным М. д., является [вигнеровский кристалл](#), в котором электроны при малой плотности локализуются и образуют периодич. структуру.

## Литература

Лит.: Мотт Н. Ф. Переходы металл–изолятор. М., 1979.