

на рисунке, малое смещение соседних ионов может обусловить появление структуры с удвоенной постоянной решетки (и соответствующее увеличение числа базисных атомов). Увеличение размера ячейки Вигнера — Зейтца соответствует уменьшению размера зоны Бриллюэна и, следовательно, возможному расщеплению соединенных прежде зон. Примеры этого обсуждались Адлером [101.21].

Подобный аргумент был использован Слэтером для объяснения изолирующих свойств некоторых окислов переходных металлов. Антиферромагнитное спиновое упорядочение в основном состоянии металла с полузаполненной валентной зоной *) означает удвоение постоянной решетки, по крайней мере — для обменной части решеточного потенциала. Отсюда опять вытекает возможность расщепления зоны между занятыми и незанятыми состояниями **).

Нарушение периодичности решетки. В неупорядоченных решетках состояния около краев зоны становятся локализованными (см. § 29). При изменении степени неупорядоченности делокализованные состояния вблизи энергии Ферми становятся локализованными и может иметь место переход металл — изолятор (*переход Андерсона*). Поскольку в этой главе мы имеем дело только со строго периодическими решетками, оставим обсуждение такой возможности локализации до гл. 3.

В этом параграфе мы ограничились перечислением возможных механизмов переходов металл — изолятор. Вопрос о том, какой из этих механизмов ответствен за данное экспериментальное наблюдение, обсуждать здесь мы не можем. В отношении всего упомянутого круга вопросов отсылаем читателя прежде всего к книге Мотта [93]. Дополнительную литературу по содержанию этого параграфа можно найти в [101.21], [111а.33].

§ 10. Пределы применимости уравнения Больцмана, формулы Кубо и Кубо — Гринвуда

При выходе за пределы применимости зонной модели справедливость уравнения Больцмана как основы для описания явлений переноса также ограничена.

Уравнение Больцмана основывается на представлении о свободном движении электронов в твердом теле под действием внешних полей, которое прерывается процессами взаимодействия с решеткой (испускание и поглощение фононов). Рассматриваемые таким способом электроны представляются как волновые пакеты из блоховских функций. Центр тяжести волнового пакета (k_0 , r_0) определяет волновой вектор и местоположение электрона. При таком описании протяженность волнового пакета в k -пространстве должна быть

*) Имеется в виду, конечно, переходный металл. (Примеч. пер.)

**) Т. е. образование энергетической щели. (Примеч. пер.)