

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

539.91

**ОДНОЭЛЕКТРОННАЯ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ И КРИТЕРИЙ
МЕТАЛЛ — НЕМЕТАЛЛ ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ
ТЕЛ****С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон**

(Институт физики металлов УрО АН СССР, Свердловск)

Еще в 1935 г. С. П. Шубин [1] указал на возможность очень изящной формулировки основ зонной теории на языке одноэлектронной матрицы плотности $\hat{\rho}$. В дальнейшем предполагалось включить в теорию межэлектронное взаимодействие и сформулировать строгий критерий металл — неметалл (КМН) для многоэлектронных систем. Однако эта работа, которую С. П. Шубин выполнял с одним из нас (С. В. В), осталась незавершенной из-за ареста С. П. Шубина в 1937 г. и его трагической гибели. Кроме [1], в развитие идей С. П. Шубина опубликованы работы М. И. Сергеева [2], а также работы [3, 4]. Но в целом развитие многочастичной теории твердого тела пошло совсем по другому пути. Однако и сейчас, пятьдесят лет спустя, мы видим, что полученные за это время результаты не сделали шубинский подход устаревшим. Более того, по нашему мнению, он до сих пор сохраняет большое, по крайней мере методическое, значение. Развитию этих идей на современном уровне и посвящена настоящая работа.

В кристалле выполняются условия периодичности для матрицы плотности $\hat{\rho}$ в координатном представлении:

$$\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (1)$$

$$\rho(\mathbf{r}' + \mathbf{R}_n, \mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$, $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ — операторы рождения и уничтожения электрона в точке $\mathbf{r}$ с проекцией спина σ , $\mathbf{R}_n$ — вектор трансляции. Исследуем свойства собственных функций одночастичной матрицы плотности $\varphi_i(\mathbf{r})$

$$\int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') = \rho_i \varphi_i(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Под действием на левую часть (3) оператором трансляции $\hat{T}_n$ на вектор $\mathbf{R}_n$:

$$\begin{aligned} \hat{T}_n \hat{\rho} \varphi_i &= \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') = \\ &= \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n, \mathbf{r}' + \mathbf{R}_n) \varphi_i(\mathbf{r}' + \mathbf{R}_n) = \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}' + \mathbf{R}_n) = \hat{\rho} \hat{T}_n \varphi_i. \end{aligned} \quad (4)$$

Тогда, следуя стандартной схеме доказательства теоремы Блоха [5], легко показать, что функции $\varphi_i(\mathbf{r})$ могут быть представлены в

блоховском виде:

$$\varphi_{\zeta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) u_{\zeta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (5)$$

где $i \equiv (\mathbf{k}, \zeta)$, $\mathbf{k}$ — квазиимпульс, принимающий значения в первой зоне Бриллюэна, ζ — «индекс номера зоны»,

$$u_{\zeta}(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u_{\zeta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (6)$$

В пренебрежении межэлектронным взаимодействием $\hat{\rho} = f(\hat{H}_0)$, $\rho_{\zeta}(\mathbf{k}) = f(E_{\zeta}(\mathbf{k}))$, где $\hat{H}_0$ — одночастичный гамильтониан, $E_{\zeta}(\mathbf{k})$ — зонный спектр, $f(E)$ — фермиевская функция распределения. Тогда функции (5) являются одновременно решением уравнения Шрёдингера. В многочастичной системе, вообще говоря, $[\hat{\rho}, \hat{H}_0] \neq 0$, и функции (5), а также собственные значения $\rho_{\zeta}(\mathbf{k})$ не имеют прямого отношения к энергетическому спектру. Тем не менее подчеркнем еще раз, что они могут быть введены совершенно строго и, как будет показано ниже, играют исключительно важную роль в обосновании зонной теории.

Непосредственно из (5), (6) можно вывести, как в [5], матричный элемент координаты $\hat{x}_{\alpha}$ в представлении $i \equiv (\mathbf{k}, \zeta)$:

$$\langle \mathbf{k}\zeta | x_{\alpha} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle = \langle \mathbf{k}\zeta | x_{\alpha}^{(1)} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle + \langle \mathbf{k}\zeta | x_{\alpha}^{(2)} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle, \quad (7a)$$

$$\langle \mathbf{k}\zeta | x_{\alpha}^{(1)} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle = i \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\zeta\zeta'}, \quad (7b)$$

$$\langle \mathbf{k}\zeta | x_{\alpha}^{(2)} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \int d\mathbf{r} u_{\zeta}^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} u_{\zeta'}(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (7b)$$

и среднее значение оператора скорости $\hat{v}_{\alpha} = \hat{x}_{\alpha}$ в состояниях (5)

$$v_{\alpha}(\mathbf{k}, \zeta) = \left\langle \mathbf{k}\zeta \left| \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{x}_{\alpha}] \right| \mathbf{k}\zeta \right\rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} \langle \mathbf{k}\zeta | H_0 | \mathbf{k}\zeta \rangle. \quad (8)$$

Перейдем теперь к рассмотрению вопроса об ускоряющем действии постоянного однородного электрического поля $\mathbf{F}$ на электронную систему кристалла. Именно при решении этого вопроса, как подчеркивал С. П. Шубин [1], определяется КМН, играющий центральную роль в зонной теории. Гамильтониан в электрическом поле имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_F = \sum_j \hat{H}_0(j) - eF_{\alpha} \sum_j \hat{x}_{\alpha}(j) + \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \hat{W}(j, j') \equiv \hat{\mathcal{H}} - eF_{\alpha} \hat{x}_{\alpha}, \quad (9)$$

где j — индекс, нумерующий электроны, $\hat{W}(j, j')$ — гамильтониан межэлектронного взаимодействия. Запишем уравнение движения для матрицы плотности всей многоэлектронной системы $\hat{U}$ [6]:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = [\hat{\mathcal{H}} - eF_{\alpha} \hat{x}_{\alpha}, \hat{U}],$$

и перейдем к «представлению взаимодействия»

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t) &= \left(\exp \frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar} \right) \hat{U}(t) \exp \left(-\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar} \right), \\ \hat{x}_{\alpha}(t) &= \left(\exp \frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar} \right) \hat{x}_{\alpha} \exp \left(-\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

и т. д. Отметим, что оно также было впервые предложено С. П. Шубиным и использовано в его неопубликованных вычислениях, а также в работе [7], выполненной одним из нас по его предложению.

Для среднего значения любого оператора $\hat{A}$ имеем [6]

$$\langle A(t) \rangle = \text{Sp}(\hat{A}\hat{U}(t)) = \text{Sp}(\hat{A}(t)\tilde{U}(t)), \quad (12)$$

а уравнение движения (10) принимает вид

$$\frac{\partial \tilde{U}(t)}{\partial t} = \frac{ieF_\alpha}{\hbar} [\hat{x}_\alpha(t), \tilde{U}(t)]. \quad (13)$$

Представим $\hat{x}_\alpha(t)$ в виде

$$\hat{x}_\alpha(t) = \hat{x}_\alpha + \int_0^t d\tau \hat{v}_\alpha(\tau) \equiv \hat{x}_\alpha^{(1)} + \hat{x}_\alpha^{(2)} + \int_0^t d\tau \hat{v}_\alpha(\tau). \quad (14)$$

В представлении $|\mathbf{k}\zeta\rangle$ лишь первый член содержит сингулярность типа производной от δ -функции. Как $\hat{x}_\alpha^{(2)}$, так и $\hat{v}_\alpha(t)$ менее сингулярны. Они приводят к межзонным переходам — к зинеровскому пробою, но могут быть отброшены при расчете отклика системы на слабое постоянное однородное поле, т. е. при выводе КМН [5]. Поэтому заменим в (13) $\hat{x}_\alpha(t) \rightarrow \hat{x}_\alpha^{(1)}$. Запишем матрицу плотности всей N -электронной системы $\tilde{U}$ в представлении (5):

$$\langle \mathbf{k}_1\zeta_1, \dots, \mathbf{k}_N\zeta_N | \tilde{U} | \mathbf{k}'_1\zeta'_1, \dots, \mathbf{k}'_N\zeta'_N \rangle.$$

Из (76) следует, что для одночастичного оператора $\hat{f}$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}\zeta | [\hat{x}_\alpha^{(1)}, \hat{f}] | \mathbf{k}'\zeta' \rangle &= \sum_{\mathbf{k}''\zeta''} [\langle \mathbf{k}\zeta | \hat{x}_\alpha^{(1)} | \mathbf{k}''\zeta'' \rangle \langle \mathbf{k}''\zeta'' | \hat{f} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle - \\ &- \langle \mathbf{k}\zeta | \hat{f} | \mathbf{k}''\zeta'' \rangle \langle \mathbf{k}''\zeta'' | \hat{x}_\alpha^{(1)} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle] = i \left(\frac{\partial}{\partial k_\alpha} + \frac{\partial}{\partial k'_\alpha} \right) \langle \mathbf{k}\zeta | \hat{f} | \mathbf{k}'\zeta' \rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Тогда уравнение (13) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{k}_1\zeta_1, \dots, \mathbf{k}_N\zeta_N | \tilde{U}(t) | \mathbf{k}'_1\zeta'_1, \dots, \mathbf{k}'_N\zeta'_N \rangle &= \\ = -\frac{eF_\alpha}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial k_{j\alpha}} + \frac{\partial}{\partial k'_{j\alpha}} \right) \langle \mathbf{k}_1\zeta_1, \dots, \mathbf{k}_N\zeta_N | \tilde{U}(t) | \mathbf{k}'_1\zeta'_1, \dots, \mathbf{k}'_N\zeta'_N \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Как нетрудно убедиться прямой подстановкой, решение задачи Коши для уравнения (6) имеет вид

$$\langle \mathbf{k}_1\zeta_1, \dots | \tilde{U}(t) | \mathbf{k}'_1\zeta'_1, \dots \rangle = \langle \tilde{\mathbf{k}}_1(t)\zeta_1, \dots | \tilde{U}(0) | \tilde{\mathbf{k}}'_1(t)\zeta'_1, \dots \rangle, \quad (17)$$

где $\tilde{\mathbf{k}}_i(t) = \mathbf{k}_i - (e\mathbf{F}t/\hbar)$. Тогда и одночастичная матрица плотности $\hat{\rho}$, получающаяся из $\tilde{U}$ сверткой по координатам всех электронов, кроме одного, зависит от времени по закону

$$\rho_\zeta(\mathbf{k}, t) = \rho_\zeta(\tilde{\mathbf{k}}(t), 0) \quad (18)$$

(напоминаем, что в представлении (5) $\hat{\rho}$ диагонально). Тогда среднее значение любого одночастичного оператора $\hat{A}$ зависит от времени как

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \sum_{\mathbf{k}, \zeta} \langle \mathbf{k}\zeta | A | \mathbf{k}\zeta \rangle \rho_\zeta(\tilde{\mathbf{k}}(t), 0) = \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \zeta} \left\langle \mathbf{k} + \frac{e\mathbf{F}t}{\hbar}, \zeta | A | \mathbf{k} + \frac{e\mathbf{F}t}{\hbar}, \zeta \right\rangle \rho_\zeta(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (19)$$

Выражение (19) формально имеет тот же вид, что и в одночастичной теории [1], но, как показано выше, справедливо и для многочастичных

систем в пренебрежении межзонными переходами (подчеркнем, что зонный индекс ξ вводится уравнениями (3), (5) и не имеет больше прямого отношения к энергетическому спектру).

Возьмем в качестве $\hat{A}$ оператор плотности тока $\hat{j}_\alpha = e\hat{v}_\alpha$ и вычислим производную по t при $t=0$, как обычно при выводе КМН [5]. Мы получим $(j_\alpha = \langle j_\alpha(t) \rangle)$:

$$\frac{dj_\alpha}{dt} = e^2 F_\beta \sum_{\mathbf{k}, \xi} m_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{k}, \xi) \rho_\xi(\mathbf{k}), \quad (20)$$

где

$$m_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{k}, \xi) = \hbar^{-1} \frac{\partial}{\partial k_\beta} v_\beta(\mathbf{k}, \xi) = \hbar^{-2} \frac{\partial^2}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \langle \mathbf{k} \xi | H_0 | \mathbf{k} \xi \rangle \quad (21)$$

играет роль тензора обратных эффективных масс. Как и в обычной зонной теории, эта величина периодична по $\mathbf{k}$ в обратной решетке. Поэтому, если $\rho_\xi(\mathbf{k}) = \rho_\xi$ не зависит от $\mathbf{k}$, вклад соответствующей зоны в dj_α/dt обращается в нуль. Это доказывается, как обычно [5], сведением объемного интеграла (20) к поверхностному интегралу по границе зоны Бриллюэна от $v_\beta(\mathbf{k}, \xi)$, в котором компенсируются вклады противоположных граней. В обычной зонной теории возможны случаи $\rho_\xi = 0$ (пустая зона) и $\rho_\xi = 1$ (заполненная зона), а известный КМН Вильсона [5] формулируется так: если при температуре $T=0$ все зоны либо заполнены, либо пусты, кристалл не является металлом. Обобщение на многоэлектронный случай, как показано в настоящей работе, модифицирует этот критерий в двух отношениях: во-первых, классификация по зонам проводится для собственных функций одночастичной матрицы плотности, а не одноэлектронного гамильтониана, и во-вторых, необходимо учесть возможность $\rho_\xi = \text{const} \neq 0; 1$, когда система также является неметаллом. Таким образом, доказано, что система не может быть металлом, если при $T=0$ зоны заполнены равномерно. Обратное, вообще говоря, неверно: можно подобрать распределение $\rho_\xi(\mathbf{k})$, отличное от константы, но дающее нулевой интеграл в (20).

Приведем ряд конкретных примеров на применение сформулированного КМН к многочастичным системам. В качестве первого примера рассмотрим приближение, использованное Гутцвиллером [8] для описания сильно коррелированного электронного газа. В этом приближении получается очень простое выражение для функции распределения $\rho(\mathbf{k}) = \sum_\sigma \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{k}) &= a_1, & E_{\mathbf{k}} < E_F, \\ &= a_2, & E_{\mathbf{k}} > E_F, \end{aligned} \quad (22)$$

где $0 < a_2 < a_1 < 1$; $Z = a_1 - a_2$ — скачок функции распределения на поверхности Ферми $E_{\mathbf{k}} = E_F$. Подстановка (22) в (20) приводит после интегрирования по частям к результату

$$\begin{aligned} \frac{dj_\alpha}{dt} &= \frac{e^2 F_\beta}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial v_\beta(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} \rho(\mathbf{k}) = - \frac{e^2 F_\beta}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} v_\beta(\mathbf{k}) \frac{\partial \rho(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} = \\ &= \frac{Ze^2 F_\beta}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} v_\beta(\mathbf{k}) \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_F). \end{aligned} \quad (23)$$

Отсюда, в частности, следует, что $dj_\alpha/dt \sim Z$ и обращается в нуль при $Z \rightarrow 0$, так что Z в приближении Гутцвиллера играет роль «эффективного числа носителей», что отмечалось в [9, 10] из других соображений.

Вторым интересным примером может служить случай антиферромагнитного диэлектрика. Этот случай соответствует, в частности, основному состоянию узкозонной модели Хаббарда при числе электронов, равном числу узлов. Впервые антиферромагнитный диэлектрик был рассмотрен Слэтером [11]; более подробно см. [12]. В этой системе отличны от нуля одночастичные средние

$$\langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} \rangle = u_k^2, \quad \langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k+\kappa\downarrow} \rangle = u_k v_k, \quad (24)$$

$$\langle c_{(k+\kappa)\downarrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} \rangle = u_k v_k, \quad \langle c_{k+\kappa\downarrow}^{\dagger} c_{k+\kappa\downarrow} \rangle = v_k^2,$$

где κ — вектор антиферромагнетизма, u_k, v_k — параметры u — v -преобразования Боголюбова, выражающиеся через затравочный электронный спектр [12]. Для нас существенно лишь выполнение условия

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (25)$$

Чтобы найти ρ_k , необходимо диагонализировать матрицу с элементами (24):

$$\det \begin{vmatrix} u_k^2 - \rho_k & u_k v_k \\ u_k v_k & v_k^2 - \rho_k \end{vmatrix} = 0. \quad (26)$$

Из (26) с учетом (25) следуют два решения: $\rho_k = 0$ и $\rho_k = 1$. Таким образом, состояние со средними вида (24) в соответствии со сформулированным КМН является неметаллическим (в [12] это показано прямым расчетом зависящей от частоты проводимости).

Третьим нетривиальным примером может служить узкозонная модель Хаббарда в пределе почти половинного заполнения зоны (см. [13]). Как показано в [13], носители с «неправильной» проекцией спина в ферромагнитной фазе описываются в этой модели функцией Грина

$$G_+(\mathbf{k}, E) = \sum_{\mathbf{q}} [f_{\mathbf{q}} + N_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}] (E - t_{\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^{-1}, \quad (27)$$

где $t_{\mathbf{q}}$ — затравочный электронный спектр, $f_{\mathbf{q}} = f(t_{\mathbf{q}})$, $\omega_{\mathbf{q}}$ — частота магнов, $N_{\mathbf{q}} = N(\hbar\omega_{\mathbf{q}})$ — бозевская функция распределения. В пренебрежении магнонной энергией $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, $G_+(\mathbf{k}, E)$ не зависит от $\mathbf{k}$, и, следовательно, оказывается не зависящей от $\mathbf{k}$ и функция распределения

$$\rho_+(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \operatorname{Im} G_+(\mathbf{k}, E). \quad (28)$$

Таким образом, состояния с «неправильной» проекцией спина в этой модели являются бестоковыми с точностью до отношения массы электрона к массе магнона. В [13] этот вывод был сделан на основании довольно громоздкого расчета проводимости.

Приведенные выше примеры демонстрируют полезность предложенного КМН при анализе конкретных многочастичных моделей. Он дает возможность также обсудить один весьма важный общий вопрос: можно ли связать переходы металл — изолятор (ПМИ) с изменением симметрии системы [14]? Оказывается, это возможно, причем металлическая фаза играет роль низкосимметричной (упорядоченной). Дело в том, что если матрица плотности $\hat{\rho}$ кратна единичной (для простоты ограничимся однозонным приближением), то ее собственные функции — это произвольный ортонормированный набор линейных комбинаций блоховских функций (5). Иными словами, заполненную зону можно описать слэтеровским детерминантом не обязательно из блоховских функ-

ций, но и из функций Ванье, и бесконечным числом других таких способов. Для частично заполненной зоны блоховское представление выделено. Это, по-видимому, и есть та симметрия неметаллической фазы, которая нарушается при ПМИ. Непрерывность энергетического спектра металла вблизи основного состояния можно тогда трактовать как проявление теоремы Голдстоуна, а одночастичную матрицу плотности

$$\sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}') \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \quad (29)$$

— как корреляционную функцию параметра порядка: она убывает экспоненциально при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ в неметаллической фазе (а при $\rho(\mathbf{k}) = \text{const}$ вообще пропорциональна $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$) и степенным образом — в металлической (из-за скачка $\rho(\mathbf{k})$ на поверхности Ферми). Таким образом, хотя параметр порядка при ПМИ ввести затруднительно или даже невозможно, понятия дальнего порядка и нарушения симметрии применимы к этому типу фазовых переходов.

Было бы интересно применить язык точной одночастичной матрицы плотности к другим проблемам физики твердого тела, в частности, к рассмотрению электрон-фононного взаимодействия. Однако приведенных примеров, по нашему мнению, достаточно, чтобы убедиться в плодотворности идеи, высказанной С. П. Шубиным пятьдесят лет назад и не реализованной потом в развитии зонной теории по причинам, связанным с трагическими событиями нашей истории.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Шубин С П // ДАН СССР. 1935. Т. 8 С 15
2. Сергеев М. И // ЖЭТФ. 1938. Т. 8 С 948.
3. Вонсовский С В // Изв. АН СССР Сер физ. 1948 Т 12 С 337.
4. Вонсовский С В // Ibidem 1952 Т 16 С 387
5. Вонсовский С. В, Кацнельсон М И Квантовая физика твердого тела — М. Наука, 1983.
6. Ландау Л Д, Лифшиц Е М Квантовая механика (Нерелятивистская теория). — М.: Наука, 1974.
7. Vonsovsky S V // J. Phys USSR. 1946 V. 10 P. 367
8. Gutzwiller M C // Phys Rev. 1965 V 137 P A 1726
9. Brinkman W. F., Rice T. M. // Phys Rev Ser B. 1970 V 2 P 4302
10. March N. H., Suzuki M., Parinello M // Ibidem 1979 V 19 P 2027.
- [11] Slater J C // Phys Rev. 1951. V. 82. P 538
12. Katsnelson M I, Irkhin V Yu // J Phys Ser C. 1984. V 17 P 4291
13. Ирхин В Ю, Кацнельсон М И // ФТТ 1983 Т. 25 С 3383, J Phys Ser C 1985 V. 18 P. 4173
14. Вонсовский С В, Кацнельсон М И // Электронная структура и свойства твердых тел / Под ред Ю А Изюмова — Свердловск Изд во УНЦ, 1982 — С 3