

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА
И ФИЗИКА МНОГОЧАСТИЧНЫХ
МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

*А. Л. Куземский**

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	6
КВАНТОВАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА И ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА	7
МАГНЕТИЗМ ВЕЩЕСТВА И МОДЕЛИ МАГНЕТИЗМА	9
КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ МАГНЕТИЗМА	14
МЕТОД МОДЕЛЬНЫХ ГАМИЛЬТониАНОВ	16
ТЕОРИЯ СИСТЕМ МНОГИХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧА- СТИЦ	28
НАРУШЕННАЯ СИММЕТРИЯ, КВАЗИСРЕДНИЕ И ФИЗИКА МАГНЕТИЗМА	61
НЕРАВНОВЕСНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ И КВАЗИСРЕДНИЕ В ТЕОРИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ	71
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	83
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	83

*E-mail: kuzemsky@theor.jinr.ru; <http://theor.jinr.ru/~kuzemsky>

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА И ФИЗИКА МНОГОЧАСТИЧНЫХ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

*А. Л. Куземский**

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Рассматривается развитие методов квантовой статистической механики и их применение к квантовой теории твердого тела. Обсуждаются принципиальные вопросы физики магнетизма, методы квантовой теории магнетизма и, в частности, метод двухвременных температурных функций Грина, широко используемый в различных задачах физики систем многих взаимодействующих частиц. Дано изложение некоторых новых самосогласованных методов описания квантовых кооперативных эффектов и квазичастичной динамики основных микроскопических моделей магнетизма: модели Гейзенберга, модели Хаббарда, модели Андерсона, спин-фермионной модели и т. п. Проведен сравнительный анализ этих моделей и их применимости для описания сложных магнитных веществ. Проанализированы концепции нарушенной симметрии, квантового протектората и квазисредних в контексте квантовой теории магнетизма и сверхпроводимости. Изложена концепция нарушенной симметрии в подходе неравновесного статистического оператора Зубарева. В рамках этого метода обсуждается вывод кинетических уравнений для системы в термостате. Изучено динамическое поведение частицы в среде с учетом эффектов диссипации.

The development of the methods of quantum statistical mechanics and their application to quantum solid state theory and, in particular, to quantum theory of magnetism are considered. A broad class of the problems of condensed matter physics, in particular in the fields of the magnetism and superconductivity of the complex materials, in relation to the author's works are reviewed. The method of the Green functions as well as the concepts of symmetry breaking, quasiaverages and quantum protectorate are discussed in the context of quantum theory of magnetism and BCS-Bogoliubov theory of superconductivity. The method of the nonequilibrium statistical operator developed by D.N.Zubarev is employed to derive and analyze generalized kinetic equations. The Schrödinger-type equation for the average amplitude describing the energy shift and damping of a particle in a thermal bath and the coupled kinetic equation describing the dynamic and statistical aspects of the motion are derived and analyzed. The paper is dedicated to 100th anniversary of N. N. Bogoliubov (21.08.1909 – 13.02.1992).

PACS: 05.30.-d; 71.10.-w; 71.10.Fd; 75.10.-b

*E-mail: kuzemsky@theor.jinr.ru; <http://theor.jinr.ru/~kuzemsky>

Памяти Н. Н. Боголюбова
в связи со 100-летием со дня рождения

ВВЕДЕНИЕ

Цель данного обзора — проследить развитие некоторых методов квантовой статистической механики, сформулированных Н. Н. Боголюбовым, а также показать их эффективность при применении к задачам квантовой теории твердого тела и, в особенности, квантовой теории магнетизма. Нужно подчеркнуть, что путь к пониманию основ современной статистической механики и разработка эффективных методов расчета различных физических характеристик многочастичных систем были весьма сложными. Современная статистическая механика была заложена и сформулирована в трудах Дж. П. Джоуля (1818–1889), Р. Клаузиуса (1822–1888), У. Томсона (1824–1907), Дж. К. Максвелла (1831–1879), Л. Больцмана (1844–1906) и, особенно, Дж. У. Гиббса (1839–1903). Труд Гиббса «Основные принципы статистической механики» [1, 2] остается одной из высочайших вершин современной теоретической науки. Большой вклад в разработку современных методов равновесной и неравновесной статистической механики был внесен работами академика Н. Н. Боголюбова (1909–1992) [3–7].

Физик-теоретик — и не только теоретик — должен ориентироваться в теоретических вопросах современной физики систем многих частиц. В-первых, статистическая механика насыщена концепциями, которые расширяют его общий физический и мировоззренческий кругозор. Во-вторых, статистическая механика и, в особенности, квантовая статистическая механика демонстрируют необычайную эффективность и предсказательную силу, которая достигается путем построения и использования весьма простых (и даже грубых) моделей. Тем не менее эти упрощенные модели позволяют описывать многообразие реальных веществ, материалов и самых нетривиальных многочастичных систем, таких как кварк-глюонная плазма, молекула ДНК или межзвездная материя. В системе многих взаимодействующих частиц большую роль играют так называемые *корреляционные эффекты* [8], которые определяют специфику поведения самых разнообразных объектов — от космических систем до атомных ядер и т. п. В особенности это относится к твердым телам. Изучение свойств систем с сильными межэлектронными корреляциями, сложным характером квазичастичных состояний и сильным потенциальным рассеянием является принципиально важной и актуальной проблемой теории конденсированного состояния вещества. Наше время характеризуется бурным ростом конструирования и использования новых материалов, которые не только находят широчайшее применение в различных прикладных областях, но и имеют выход на самые фундаментальные проблемы физики, физической

химии, молекулярной биологии и т.д. Квантовые кооперативные эффекты, такие как *магнетизм* и *сверхпроводимость*, зачастую играют определяющую или существенную роль в этих новых материалах, как и другие нетривиальные квантовые эффекты, например, квантовый эффект Холла, конденсация Бозе–Эйнштейна, квантовое туннелирование и т.п. Это направление исследований развивается очень быстро; при этом быстрыми темпами расширяется область приложений методов квантовой статистической механики. В настоящем обзоре это положение будет подтверждено на конкретных примерах.

1. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА И ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Развитие экспериментальной техники в последние годы привело к возможности синтеза и изучения обширного класса новых веществ с необычным сочетанием свойств [9–15]. Переходные и редкоземельные металлы и особенно соединения с участием переходных и редкоземельных элементов обладают весьма разнообразными свойствами. Среди них имеются магнитоупорядоченные кристаллы, сверхпроводники, соединения с переменной валентностью и тяжелыми фермионами и вещества, при определенных условиях испытывающие превращение металл–изолятор или, как лантан-марганцевые перовскиты, обладающие гигантским магнетосопротивлением с отрицательным знаком. Эти свойства находят широчайшее применение, а поэтому исследование данного класса веществ является одной из актуальных задач физики конденсированных сред.

Последовательное описание свойств веществ (как и эффективное прогнозирование свойств новых материалов) возможно лишь в том случае, когда имеется адекватная квантово-статистическая теория, опирающаяся на данные об электронной и кристаллической структурах. Основной теоретической задачей этого направления исследований, составляющей содержание *квантовой теории магнетизма* [16, 17], является изучение и усовершенствование квантово-статистических моделей, описывающих поведение обсуждаемых соединений с учетом основной особенности их электронной структуры, а именно двойственной «зонно-атомной» природы [18, 19]. Построение последовательной теории электронной структуры этих веществ сталкивается с серьезными трудностями при описании *дуализма* коллективизация–локализация в поведении электронов. Эта задача представляется исключительно важной, так как ее решение дает ключ к пониманию магнитных, электронных и других свойств этой обширной группы веществ. В работах автора исследовался вопрос о соответствии основных моделей с сильной электронной корреляцией и сложным спектром для адекватного и корректного отражения двойственного характера электронных состояний. Для этого был разработан универ-

сальный математический формализм [20], учитывающий особенности электронной структуры и позволяющий описать реальный квазичастичный спектр и возникновение магнитоупорядоченного, сверхпроводящего и диэлектрического (или полупроводникового) состояния.

Многообразные физические явления, наблюдаемые в соединениях и сплавах переходных и редкоземельных металлов [18, 19, 21], за небольшим исключением не могут быть объяснены в приближении среднего поля, которое существенно преувеличивает роль межэлектронной корреляции при расчете их статических и динамических характеристик. Среди вопросов, на которые ранее также не было дано точных и определенных ответов, и такие крайне актуальные не только с теоретической, но и с практической точки зрения проблемы, как адекватное описание *квазичастичной динамики* квантово-статистических моделей в широком интервале значений их параметров. Причина этих трудностей заключается не только в сложности вычислений динамических свойств, таких как плотность состояний, электропроводность, восприимчивость, электрон-фононная спектральная функция, сечение неупругого рассеяния медленных нейтронов и т. д., но и в отсутствии до конца разработанного метода последовательного квантово-статистического анализа многочастичного характера взаимодействий в таких системах. Для описания различных динамических характеристик моделей с сильной электронной корреляцией использовался самосогласованный подход [20, 22–27], позволяющий последовательно и весьма компактно вычислять квазичастичные спектры с учетом затухания для сильновзаимодействующих многочастичных систем. Корреляционные эффекты и учет затухания квазичастиц являются определяющими при анализе нормальных свойств высокотемпературных сверхпроводников и механизма перехода в сверхпроводящую фазу. Нами была сформулирована общая схема теоретического описания электронных состояний многочастичных систем при учете сильной межэлектронной корреляции [20, 22–24, 26, 27], представляющая собой синтез метода двухвременных температурных функций Грина [16] и методов диаграммной техники. Особенностью данного подхода является четкое разделение процессов упругого и неупругого рассеяния в многочастичной системе (что является крайне нетривиальным, когда взаимодействие очень велико). В результате удается корректно построить базовое приближение в терминах обобщенного среднего поля (поправки упругого рассеяния). Оно позволяет описать магнитоупорядоченное или сверхпроводящее состояние системы. Остаточные корреляционные эффекты, приводящие к затуханию квазичастиц, описываются с помощью уравнения Дайсона с формально точным представлением массового оператора. При этом необходимо отметить, что если для соединений с тяжелыми фермионами модельный гамильтониан может считаться установленным (периодическая модель Андерсона или периодическая решетка Кондо) и основные трудности теории заключаются в построении корректного приближения,

то для высокотемпературных сверхпроводников или лантан-марганцевых перовскитов окончательно не установлены ни модели, ни тем более адекватные приближенные аналитические методы их решения. Поэтому многое еще предстоит сделать для преодоления указанных трудностей [28]. Вот почему развитие и усовершенствование методов квантовой статистической механики по-прежнему остается весьма актуальным направлением исследований.

2. МАГНЕТИЗМ ВЕЩЕСТВА И МОДЕЛИ МАГНЕТИЗМА

Принято считать, что возникновение магнитоупорядоченного состояния в переходных металлах есть следствие атомоподобного характера d -состояний, но главным образом это есть результат внутриатомных обменных взаимодействий. Для того чтобы лучше понять генезис квантовых моделей магнетизма, мы обсудим здесь вкратце физические аспекты магнитных свойств твердых тел. Магнетизм вещества относится к тем явлениям природы, которые были замечены очень давно [17, 29]. И хотя считается, что мы реже замечаем магнитные явления в природе, чем электрические, тем не менее, как отмечает В. Вайскопф, «... магнетизм — явление поразительное; когда мы держим в руке магнит и кусок железа, то замечаем силу особого рода — некую "силу природы", подобную силе тяжести» [30]. Интересно отметить, что с исследования именно явления магнетизма начался новый подход к науке, основанный на результатах опыта. Этот так называемый *индуктивный* метод, который настаивал на поисках истины о природе не в дедукции, не в силлогизмах и формальной логике, но в самих вещах, в эксперименте, был впервые применен придворным врачом королевы Елизаветы Вильямом Гильбертом (1544–1603). В своей книге «О магните, магнитных телах и о большом магните — Земле» [31], вышедшей в 1600 г., он описал более 600 специально поставленных опытов над магнитными телами, которые привели его к чрезвычайно важному и неожиданному для современников выводу о том, что Земля представляет собой гигантский сферический магнит. Исследования магнетизма Земли и планет представляют собой интересную и весьма актуальную проблему современной науки [32–34]. Таким образом, именно с исследования физики магнитных явлений началась современная, основанная на эксперименте, наука. Заметим, что книга Гильберта вышла за двадцать лет до появления труда Френсиса Бэкона (1561–1626) «Новый Органон», с именем которого часто связывают создание современного научного метода.

Ключом к пониманию природы магнетизма стало обнаружение тесной связи магнетизма с электричеством [35]. Долгое время понимание природы магнетизма основывалось на гипотезах о том, как именно магнит создает магнитную силу. Андре Ампер (1775–1836) предположил, что обычный стальной магнит должен действовать по тому же принципу, что и электрический ток,

текущий по круговой или спиральной проволоке. Его гипотеза состояла в том, что в каждом атоме имеется слабый круговой ток; если большинство этих атомных токов ориентировано в одном направлении, то возникает магнитная сила. Все дальнейшее развитие теории магнетизма вещества состояло в развитии и уточнении этой гипотезы Ампера о *молекулярных токах*. В продолжение этой идеи Ампера было высказано предположение о том, что магнит — это совокупность элементарных двойных полюсов — *магнитных диполей*, которые состоят из двух неразрывно связанных между собой магнитных полюсов. В 1907 г. Пьер Вейсс (1865–1940) предложил феноменологическую картину магнитоупорядоченного состояния вещества. Он впервые провел феноменологический количественный анализ явления магнетизма вещества [36]. При этом Вейсс опирался на введенное им понятие молекулярного поля. В дальнейшем этот подход получил название приближения молекулярного (или среднего (эффективного)) поля, которое широко применяется вплоть до настоящего времени [37]. Простейшая атомная модель ферромагнетика в приближении молекулярного поля рассматривает ферромагнетик, электроны которого образуют свободный газ магнитных стрелок (*магнитных диполей*), имитирующих молекулярные амперовские токи. В простейшем случае предполагалось, что эти «элементарные магниты» могут быть ориентированы в пространстве либо вдоль какого-то определенного направления, либо против него. Для нахождения термодинамически равновесного значения намагниченности $\langle M \rangle$ как функции температуры T необходимо обратиться к термодинамике с ее весьма общими положениями. Особенно это необходимо при рассмотрении поведения системы при конечных температурах. При этом задача об отыскании намагниченности ферромагнетика приводит нас к задаче об определении энергии системы $E(\langle M \rangle)$ как функции намагниченности. Для этого требуется найти минимум свободной энергии $F(\langle M \rangle)$, которая определяется следующим образом [35]:

$$F(\langle M \rangle) = E(\langle M \rangle) - TS(\langle M \rangle). \quad (1)$$

Здесь $S(\langle M \rangle)$ — энтропия системы как функция намагниченности. Существенно подчеркнуть, что задача об отыскании энтропии системы не может быть решена в рамках только термодинамики. Для ее решения следует обратиться к статистической механике [1, 38–41], которая дает обоснование термодинамических законов. Заметим, что исследования термодинамически равновесного значения намагниченности $\langle M \rangle$ как функции температуры T или, в более общем виде, изучение соотношения между свободной энергией и параметром порядка в магнетиках и пироэлектриках продолжают до настоящего времени [42–45], конечно, с учетом накопленного опыта.

В подходе П. Вейсса исследуется возникновение самопроизвольной намагниченности $\langle M \rangle \neq 0$ при $H = 0$. При этом вводится (постулируется)

зависимость энергии системы $E(\langle M \rangle)$ в виде

$$E(\langle M \rangle) \simeq NI(\langle M \rangle)^2. \quad (2)$$

Это выражение учитывает взаимодействие между элементарными магнитами (стрелками). Здесь I — энергия молекулярного поля Вейсса, отнесенная к одной атомной магнитной стрелке. Микроскопическая природа этого поля не раскрывается в подходе Вейсса. Условие минимума свободной энергии $F(\langle M \rangle)$ приводит к соотношению вида

$$\langle M \rangle = \text{th}(T_C \langle M \rangle / T), \quad (3)$$

где T_C — температура Кюри или критическая температура, при которой происходит возникновение самопроизвольной намагниченности системы при понижении температуры. Температура Кюри названа в честь Пьера Кюри (1859–1906), который установил закон для восприимчивости χ парамагнитных веществ:

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\langle M \rangle}{H} = \frac{C}{T}. \quad (4)$$

Параметр Кюри C имеет различные (положительные) значения, зависящие от материала [35]. Заметим, что Пьер Кюри провел обстоятельные исследования магнитных свойств железа еще в 1895 г. В ходе этих опытов он установил существование для железа критической температуры, выше которой исчезают ферромагнитные свойства. Эти работы положили основание для исследования фазовых переходов порядок–беспорядок и других фазовых превращений в газах, жидкостях и твердых телах. Данное направление исследований составило содержание физики критических явлений, которая изучает поведение вещества в окрестности критической температуры перехода [46].

Обширные исследования намагничивания и тепловых эффектов в никеле в области температуры Кюри принадлежат Вейссу и его сотрудникам [47]. Они разработали методы определения температурной зависимости самопроизвольной намагниченности образца. Знание температурной самопроизвольной намагниченности необходимо для уяснения характера магнитного превращения в изучаемом веществе. Исследования температурной зависимости магнитной восприимчивости различных веществ остаются актуальными и в настоящее время [48–50].

В подходе П. Вейсса для температуры Кюри получаем

$$T_C = 2I/k_B. \quad (5)$$

Для грубой оценки величины I возьмем $T_C = 1000$ К. Тогда для I получим $I \sim 10^{-13}$ эрг/атом. Из этого следует, что энергия молекулярного поля Вейсса может быть обусловлена только кулоновским взаимодействием электрических

зарядов [16, 35]. Расчет по методу молекулярного поля приводит к значению магнитной восприимчивости

$$\chi = \frac{N\mu_B^2 \langle M \rangle}{H} = \frac{N\mu_B^2}{k_B(T - T_C)}, \quad (6)$$

где $\mu_B = e\hbar/2mc$ — магнетон Бора (в подходе Вейсса это магнитный момент магнитных стрелок, имитирующих молекулярные амперовские токи). Данное выражение для восприимчивости носит название закона Кюри–Вейсса. Таким образом, молекулярное поле Вейсса, напряженность которого пропорциональна намагниченности, имеет следующий вид:

$$H_W = \frac{k_B T_C \langle M \rangle}{\mu_B}. \quad (7)$$

Долгое время исследователи пытались выяснить вопрос: какова же природа этого внутреннего молекулярного поля в ферромагнетиках, т. е. в результате каких взаимодействий спины электронов ориентируются параллельно друг другу? В книге [51] подчеркивается: «Первоначально пытались представить это взаимодействие электронов данного атома с окружающими электронами как некоторое квазимагнитное молекулярное поле, действующее на электрон данного атома. Эта гипотеза послужила фундаментом для теории П. Вейсса, которая в общих чертах позволила описать основные факты ферромагнетизма». Более того, было установлено, что приближение молекулярного поля Вейсса неприменимо для теоретической трактовки явлений вблизи температуры Кюри для количественного описания явлений. Были предприняты многочисленные попытки уточнения теории среднего поля Вейсса, однако они также не дали существенных результатов.

Численная оценка дает для среднего поля Вейсса значение $H_W = 10^7$ Э. Немагнитная природа молекулярного поля Вейсса была установлена прямыми опытами в 1927 г. (см. книги [35, 51]). Я. Г. Дорфман поставил следующий опыт. Пучок электронов, пропускаемый через намагниченную до насыщения никелевую фольгу, попадал на фотопластинку. Предполагалось, что если в никеле действительно существует столь сильное магнитное поле, то, проходя через намагниченную фольгу, электроны должны отклоняться. Оказалось, что ожидаемое смещение электронов чрезвычайно мало. Из опыта следовал вывод, что внутреннего поля такой большой напряженности в ферромагнетиках, как это следует из теории Вейсса, не существует. Значит, в ферромагнетиках упорядочивание спинов обязано вовсе не силам магнитного происхождения. Интересно, что относительно недавно, в 2001 г., подобные опыты были проведены вновь [52] (конечно, в существенно модифицированном виде). Использовался пучок поляризованных «горячих» электронов, которые рассеивались на тонких ферромагнитных пленках никеля, железа и кобальта.

Измерялась поляризация пучка электронов после рассеяния. Для теоретического анализа использовалась концепция *обменного поля Вейсса* [52, 53] $\mathbf{W}(x) \sim -J_\alpha \mathbf{S}(x)$, реальная часть которого соответствует *обменному взаимодействию* между падающим электроном и электронной плотностью пленки (мнимая часть отвечает за процессы поглощения). Выведенные уравнения, описывающие рассеяние пучка, весьма близко напоминают соответствующие уравнения для эффекта вращения Фарадея для света, проходящего через намагниченную среду [53]. Теоретическое рассмотрение основывается на использовании *приближения среднего поля*, а именно на замене

$$\mathbf{W} \simeq \langle \mathbf{W}(x) \rangle = J_\alpha \langle \mathbf{S}(x) \rangle. \quad (8)$$

Последующее весьма строгое и детальное рассмотрение [53] с целью вывода эффективной квантовой динамики поля $\mathbf{W}(x)$ показало, что эта динамика описывается уравнением Ландау–Лифшица. Изменения $\mathbf{W}(x)$ во времени и пространстве описывают спиновые волны; квантами обменного поля Вейсса являются магноны.

Нужно отметить, что в своем первоначальном варианте молекулярное поле Вейсса считалось равномерно распределенным по всему объему образца и имело одинаковую величину во всех точках вещества. Совершенно другая ситуация имеет место для особого класса веществ, называемых антиферромагнетиками. Для антиферромагнетиков при понижении температуры ниже определенной температуры возникает магнитоупорядоченное состояние в виде двух вставленных друг в друга подрешеток с противоположными направлениями намагниченностей. Эта температура получила название температуры Нееля по имени создателя теории антиферромагнетизма Л. Нееля (1904–2000). Для объяснения природы антиферромагнетизма (а также ферромагнетизма) Л. Неель ввел содержательное и нетривиальное понятие *локальных молекулярных полей* [54]. Однако не существовало единого подхода к исследованию магнитных превращений в реальных материалах. Более того, последовательное рассмотрение разнообразных аспектов физики магнитных явлений на основе квантовой механики и статистической физики представляло и представляет собой исключительно сложную задачу, которая не получила своего полного решения вплоть до настоящего времени [55, 56]. Вот почему авторы наиболее полной по тем временам монографии о магнетизме следующим образом характеризовали положение дел в физике магнитных явлений: «Еще недавно вопросы магнетизма представлялись исключительно неблагоприятной областью для теоретических исследований. Такое положение стояло в связи с тем обстоятельством, что внимание исследователей направлялось главным образом в сторону ферромагнитных явлений, ибо эти последние играли и играют весьма крупную роль в технике. Теоретическое же толкование ферромагнетизма представляет столь значительные трудности, что и поныне названная область является одной из наиболее темных во всей физике» [57].

Магнитные свойства и строение вещества оказались взаимосвязанными. Поэтому последовательное квантово-механическое рассмотрение проблемы магнетизма вещества осознавалось большинством исследователей [51, 58–60] как весьма актуальная задача. Гейзенберг, Дирак, Хунд, Паули, Ван Флек, Слэтер и мн. др. внесли вклад в разработку квантовой теории магнетизма. Как отмечает Д. Маттис [17], «к 1930 г., после четырех лет наиболее волнующих и ярких открытий в истории теоретической физики, была заложена основа современной электронной теории вещества, после чего началась эпоха консолидации и вычислений, которая продолжается и до сего времени».

За истекшие десятилетия физика магнитных явлений превратилась в очень обширную и разветвленную отрасль современной физической науки [17, 35, 55, 56, 61–74]. Быстрое развитие физики магнетизма было обусловлено развитием и внедрением новых физических методов исследования структурных и динамических свойств магнитных веществ [75]. К этим методам относятся: магнитная нейтронография [76, 77], ЯМР и ЭПР спектроскопия, эффект Мессбауэра, новые оптические методы [78], а также, в последнее время, использование синхротронного излучения [79–82]. В частности, уникальные возможности метода рассеяния тепловых нейтронов [75–77, 83] позволяют получать информацию о магнитной и кристаллической структуре, распределении магнитных моментов, о спектре магнитных возбуждений, критических флуктуациях и т. п. Для интерпретации полученных данных по неупругому рассеянию медленных нейтронов необходимо учитывать электрон-электронные и электрон-ядерные взаимодействия в системе и принцип Паули. Здесь опять встает вопрос о последовательном рассмотрении разнообразных аспектов физики магнитных явлений на основе квантовой механики и статистической физики. Другими словами, речь идет о построении последовательной квантовой теории магнетизма вещества. Как справедливо заметил К. Иосида, «вопрос о корреляции электронов в сложных электронных системах является началом и концом всех исследований по магнетизму» [84]. Таким образом, магнетизм можно последовательно описать и интерпретировать только в рамках квантовой статистической теории многих взаимодействующих частиц.

3. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ МАГНЕТИЗМА

Известно, что «квантовая механика — ключ к пониманию магнетизма» [85]. Одним из первых шагов на этом пути была формулировка *правил Хунда* в атомной физике [63]. Как отмечает Д. Маттис [17], «накопившиеся спектроскопические данные позволили Стонеру (1899–1968. — А. К.) приписать правильное число эквивалентных электронов каждой атомной оболочке, а Хунду (1896–1997. — А. К.) провозгласить свои правила, касающиеся спонтанных магнитных моментов свободного атома или иона». Правила Хунда —

это эмпирические правила, последовательный вывод которых составляет трудную задачу. Они формулируются следующим образом:

1) Основное состояние свободного атома или иона с $L-S$ -связью является состоянием максимальной мультиплетности $(2S + 1)$ для данной конфигурации.

2) Из всех возможных состояний этой мультиплетности основным состоянием является состояние с наибольшим значением L , которое допускает принцип Паули.

Заметим, что применимость этих эмпирических правил не ограничивается случаем, когда все электроны лежат в одной незаполненной валентной оболочке. Строгого последовательного вывода этих правил Хунда нет; есть ряд частичных схем, показывающих их применимость при определенных ограничениях [63, 86] (см. недавний детальный анализ этого вопроса в работах [87, 88]). И тем не менее правила Хунда очень полезны и широко используются при анализе различных магнитных явлений. Физический анализ первого правила Хунда приводит к выводу, что в его основе лежит то обстоятельство, что диагональные матричные элементы электрон-электронного кулоновского взаимодействия содержат члены обменного взаимодействия, которые целиком отрицательны. Это происходит только для электронов с параллельными спинами. Поэтому чем больше электронов с параллельными спинами, тем больше отрицательный вклад обмена в диагональные матричные элементы энергии. Таким образом, из первого правила Хунда можно прийти к заключению, что два электрона с параллельными спинами пространственно «стремятся избегать один другого». Здесь возникает непосредственная связь правила Хунда с *принципом Паули*.

Можно сказать, что принцип Паули (1925 г.) лежит в основе квантовой теории магнетизма. Причем принцип Паули также является чисто эмпирическим правилом; однако его содержание намного глубже и значительнее [89]. Побудительным мотивом для Паули была ситуация с анализом термов ортогогелия, а именно отсутствие в системе термов предполагаемого основного состояния, т. е. уровня (1^3S). Данное обстоятельство побудило В. Паули (1900–1958) провести общую проверку спектров с целью выяснить, не выпадают ли иногда определенные термы и в случаях других элементов и при других условиях. Оказалось, что это действительно имеет место. Кроме того, проведенный анализ термов показал, что во всех случаях выпадения термов *все* квантовые числа электронов одинаковы. Обратное, оказалось, что термы всегда выпадают, когда одинаковы все квантовые числа. Именно это наблюдение и составило содержание принципа Паули:

Квантовые наборы двух (или многих) электронов никогда не могут полностью совпадать; две системы квантовых чисел, которые можно перевести одну в другую перестановкой двух электронов, определяют одно состояние.

На языке многоэлектронных волновых функций нужно рассмотреть перестановки пространственных и спиновых координат электронов i и j для случая, когда спиновые переменные $\sigma_i = \sigma_j = \sigma_0$ и пространственные координаты $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_0$ этих двух электронов одинаковы. Тогда получим:

$$P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_i\sigma_i, \dots, \mathbf{r}_j\sigma_j, \dots) = \psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_i\sigma_i, \dots, \mathbf{r}_j\sigma_j, \dots). \quad (9)$$

Из принципа Паули следует, что

$$P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_i\sigma_i, \dots, \mathbf{r}_j\sigma_j, \dots) = -\psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_i\sigma_i, \dots, \mathbf{r}_j\sigma_j, \dots). \quad (10)$$

Следовательно, оба эти условия выполняются только в случае, когда ψ обращается в нуль. Отсюда вывод: электроны неразличимы, т. е. их перестановка не должна влиять на вычисляемые свойства системы. Волновая функция меняет или сохраняет знак при перестановке двух частиц в зависимости от того, какие это неразличимые частицы — фермионы или бозоны. Следствием принципа запрета Паули является *принцип заполнения*, который приводит к периодичности свойств химических элементов. То обстоятельство, что в каждом состоянии может находиться не более одного электрона, приводит также к таким фундаментальным последствиям, как само существование твердых тел в природе. Если бы принцип Паули не выполнялся, ни одно вещество не могло бы быть твердым. Если бы у электронов не было спина (т. е. если бы они были бозонами), все вещества занимали бы меньший объем (были бы более плотными) и не обладали бы достаточной жесткостью.

Таким образом, стремление электронов с параллельными спинами «избегать один другого» уменьшает их энергию электрон-электронного кулоновского взаимодействия и, значит, понижает энергию системы. Это обстоятельство приводит ко многим важным следствиям, в частности, к возможности появления магнитных свойств вещества. Благодаря наличию внутренней недостроенной nd - или nf -оболочки все свободные атомы переходных элементов сильномагнитные в силу правила Хунда. При образовании кристалла [17, 35, 63, 68] оболочки атомов перестраиваются, и для ясного понимания свойств кристалла необходимо знать волновые функции и энергии бывших валентных электронов. В настоящее время развиты эффективные методы расчета энергетических уровней электронов в кристаллах [90–92]; качественно речь идет о том, насколько изменяются при образовании кристалла атомные волновые функции, насколько они делокализуются [19].

4. МЕТОД МОДЕЛЬНЫХ ГАМИЛЬТониАНОВ

В теории магнетизма оказался очень эффективным метод модельных гамильтонианов. Без преувеличения можно сказать, что огромные успехи физики магнитных явлений в значительной мере обусловлены использованием

для «теоретического толкования ферромагнетизма» нескольких очень простых и схематических модельных представлений [93]. Первой моделью квантовой теории магнетизма можно считать модель Изинга [94, 95]. В этой модели, сформулированной В. Ленцем (1888–1957) в 1920 г. и изученной Э. Изингом (1900–1998), предполагалось, что спины располагаются по длине одномерной цепочки с правильными интервалами. Каждый спин может принимать значение $\pm\hbar/2$:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} I_{ij} S_i^z S_j^z. \quad (11)$$

Это была одна из первых попыток описать магнетизм как *кооперативный эффект*. Интересно, что одномерная модель Изинга имеет точное решение; точное решение модели Изинга для плоской решетки было найдено Л. Онсагером (1903–1976) [96, 97] только в 1944 г. Однако модель Изинга чересчур упрощает ситуацию в реальном кристалле. Усилиями В. Гейзенберга (1901–1976) [98] и П. Дирака (1902–1984) [99] была сформулирована *модель Гейзенберга*, описывающая взаимодействие между спинами в различных узлах решетки в виде изотропного скаляра

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J(i-j) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - g\mu_B H \sum_i S_i^z. \quad (12)$$

Здесь $J(i-j)$ есть мера обменного взаимодействия между спинами в узлах решетки i и j («обменный интеграл»); обычно принимается, что $J(i-j) = J(j-i)$ и $J(i-j=0) = 0$. Это означает, что только междоузельное обменное взаимодействие принимается во внимание. Гамильтониан Гейзенберга (12) можно переписать в следующем виде:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J(i-j) (S_i^z S_j^z + S_i^+ S_j^-). \quad (13)$$

Здесь $S^\pm = S^x \pm iS^y$ — операторы повышения и понижения спина. Они удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-]_- &= 2S_i^z \delta_{ij}; & [S_i^+, S_i^-]_+ &= 2S(S+1) - 2(S_i^z)^2; \\ [S_i^\mp, S_j^z]_- &= \pm S_i^\mp \delta_{ij}; & S_i^z &= S(S+1) - (S_i^z)^2 - S_i^- S_i^+; \\ (S_i^+)^{2S+1} &= 0, & (S_i^-)^{2S+1} &= 0. \end{aligned}$$

Заметим, что для изотропной модели Гейзенберга z -компонента полного спина $S_{\text{tot}}^z = \sum_i S_i^z$ является интегралом движения, т. е. $[H, S_{\text{tot}}^z] = 0$.

Таким образом, в рамках модели локализованных спинов Гейзенберга–Дирака–Ван Флека [59, 98–101] необходимыми условиями существования

ферромагнетизма являются два следующих фактора. Атомы ферромагнетика должны обладать магнитным моментом, обусловленным недостроенной электронной d - или f -оболочкой. Обменный интеграл J_{ij} , связанный с обменом электроном между соседними атомами, должен быть положителен. При выполнении этих условий наиболее энергетически выгодным состоянием будет параллельное расположение магнитных моментов атомов в небольших областях образца (доменах) [101] в отсутствие внешнего магнитного поля. Конечно, эта картина является схематичной. Детальный вывод модели локализованных спинов Гейзенберга–Дирака–Ван Флека весьма сложен. За неимением места мы не можем входить в обсуждение этого весьма интересного вопроса [102–104]. Существенным является то, что магнитные свойства вещества обусловлены именно квантовыми эффектами — силами обменного взаимодействия [105].

Как уже упоминалось выше, в довольно большом классе веществ реализуется состояние с антипараллельным расположением соседних магнитных атомных моментов. Как правило, это различные соединения переходных и редкоземельных элементов, в которых обменный интеграл J_{ij} для соседних атомов отрицателен. Такое магнитоупорядоченное состояние называется антиферромагнетизмом [54, 106–116]. В 1948 г. Л. Неель ввел термин *ферримagnetизм* [117–122] для описания свойств таких веществ, у которых ниже некоторой определенной температуры появляется спонтанная намагниченность, обусловленная непараллельным расположением атомных магнитных моментов [109–116, 123]. Эти вещества отличаются от антиферромагнетиков, в которых подрешеточные намагниченности m_A и m_B обычно равны по абсолютной величине и противоположны по направлению, вследствие чего они взаимно компенсируются и не могут привести к большой намагниченности. В ферримангнетиках магнитные атомы, занимающие узлы A и B решетки, отличаются по виду или по количеству. Поэтому, хотя намагниченности в узлах A и B антипараллельны, образуется макроскопическая разностная спонтанная намагниченность [109, 111, 112, 116, 118].

Впоследствии были изучены вещества, обладающие *слабым ферромагнетизмом* [109–116]. Интересно, что первоначально для обозначения небольшого ферромагнитного момента, который налагался на типично антиферромагнитное поведение окисла железа $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$ (гематита) [124], Неель использовал термин *паразитный ферромагнетизм* [125]. Впоследствии это явление получило название *скошенный антиферромагнетизм*, или слабый ферромагнетизм [124, 126]. Своим происхождением слабый ферромагнетизм обязан антисимметричному взаимодействию между спинами \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 , которое пропорционально векторному произведению $\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2$. Это взаимодействие записывается в виде

$$\mathcal{H}_{\text{DM}} \sim \mathbf{D}\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2. \quad (14)$$

Взаимодействие (14) имеет название взаимодействия Дзялошинского–Мори [127, 128]. Гематит представляет собой один из самых известных минералов [124, 126, 129–131], который продолжает интенсивно изучаться [132] вплоть до настоящего времени [133–136].

Таким образом, имеется большое число веществ и материалов, в которых реализуются различные типы магнитного поведения: диамагнетизм, парамагнетизм, ферромагнетизм, антиферромагнетизм, ферримагнетизм, слабый ферромагнетизм. Причем многообразие магнетизма не исчерпывается только этими типами магнитного поведения; их существенно больше [137]. Как уже подчеркивалось, многие аспекты этого поведения можно довольно хорошо описать, пользуясь очень грубой моделью локализованных спинов Гейзенберга–Дирака–Ван Флека. Эта модель сама по себе допускает различные модификации (см., например, книгу [138]). Поэтому изучались различные нетривиальные обобщения модели локализованных спинов, в частности, исследовалась модель Гейзенберга, в которой помимо обменного взаимодействия между узлами рассматривался обмен между спинами в одном и том же узле [139]:

$$\mathcal{H} = -\mu_B H \sum_{\langle i\alpha \rangle} S_{i\alpha}^z - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha\beta} J(i\alpha; j\beta) \left(\lambda S_{i\alpha}^+ S_{j\beta}^- + S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z \right) - \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha \neq \beta} J(i\alpha; i\beta) \left(\lambda S_{i\alpha}^+ S_{i\beta}^- + S_{i\alpha}^z S_{i\beta}^z \right). \quad (15)$$

В том случае, когда $J(i\alpha; i\beta) \gg J(i\alpha; j\beta)$, этот модельный гамильтониан в определенной мере имитирует правило Хунда. В самом деле, правило Хунда утверждает, что триплетное по спину состояние двух электронов, занимающих один и тот же узел, является энергетически более выгодным, чем синглетное состояние. Именно это обстоятельство позволяет учесть модель (15). Подобная модель применялась для описания сложных ферритов, в которых имеются разные типы атомов с различными спинами (магнитными моментами). В предельном случае $J(i\alpha; i\beta) \neq 0; J(i\alpha; j\beta) \equiv 0$ модель (15) может рассматриваться как простейшая возможная модель Гейзенберга [140]. В этом случае система из двух спинов интерпретируется как простейший одномерный периодический магнетик с периодом $N = 2$ [140]. При всей своей кажущейся схематичности модель (15) находит достаточно разнообразное применение для описания реальных веществ [141], в том числе сложных солей типа $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ [142, 143], кластеров [144, 145], а также кластерных методов улучшения приближения среднего поля [146].

4.1. Проблема магнетизма коллективизированных электронов. Модель локализованных спинов Гейзенберга в основном применима к веществам, у которых энергия основного состояния отделена щелью конечной ширины

от энергии возбужденных токовых состояний, т. е. к полупроводникам и диэлектрикам [111, 147]. Между тем основные сильномагнитные вещества — никель, железо, кобальт — являются металлами, относящимися к переходной группе [35]. Квантово-статистическая теория переходных металлов и их соединений развивалась более сложным образом, чем теория простых металлов [148–151]. В основе традиционной физической картины металлического состояния лежало понятие о блоховских электронных волнах [148–152], но оставалось неясным, какую роль при этом играет межэлектронное взаимодействие. С другой стороны, развитие зонной теории магнетизма [62, 153–157] и исследование электронных фазовых переходов в соединениях переходных и редкоземельных металлов постепенно привели к пониманию определяющей роли электронной корреляции [158–160]. При этом в целом ряде случаев межэлектронное взаимодействие является очень сильным и обычное зонное описание становится неприменимым. Особые свойства переходных металлов, их сплавов и соединений в значительной мере определяются доминирующей ролью d -электронов. В отличие от простых металлов, где применимо приближение почти свободных электронов, волновые функции d -электронов более локализованы и, как правило, должны описываться в приближении сильной связи [90, 91, 161]. Основная принципиальная цель зонных теорий магнетизма и близких им теорий явлений фазовых упорядочений и переходов в сложных соединениях и окислах переходных и редкоземельных металлов состоит в том, чтобы в рамках единого подхода описать явления, где проявляется локализованный характер магнитоактивных электронов, и явления, где электроны ведут себя как коллективизированные, зонные [19]. Это кажущееся несоответствие требует очень глубокого понимания соотношения между локализованным и зонным описанием электронных состояний в переходных и редкоземельных металлах, их сплавах и соединениях. Квантово-статистическая теория систем с сильной межэлектронной корреляцией начала интенсивно развиваться, когда удалось сформулировать на языке простых модельных гамильтонианов основные черты ранних полуфеноменологических теорий. Модель Андерсона [162, 163], формализовавшая теорию примесных уровней Фриделя, как и модель Хаббарда [164–169], которая формализовала и развила ранние теории Стонера, Мотта, Слэтера, в равной степени подчеркивают роль межэлектронной корреляции. Гамильтониан Хаббарда и гамильтониан Андерсона (который можно считать локальным вариантом гамильтониана Хаббарда) играют существенную роль в электронной теории твердых тел [20]. Поэтому, как заметил Э. Либ [170], модель Хаббарда является «определенно первым кандидатом» для построения «более фундаментальной» квантовой теории магнетизма, чем «теория, основанная на модели Изинга» [170] (см. также работы [171–175]). Однако, как оказалось, изучение гамильтонианов сильнокоррелированных систем представляет собой исключительно сложную многочастичную задачу, требующую привлечения мно-

гообразных математических методов [170, 172–178]. Между тем до сих пор, за исключением нескольких частных случаев, неизвестно основное состояние модели Хаббарда. Весьма сложной проблемой оказалось определение квази-частичного спектра модели в случае сильной межэлектронной корреляции. Как справедливо отметил Д. Канамори, в случае, когда речь идет «о металлическом состоянии с параметрами, близкими к критическим, когда металл превращается в диэлектрик», то, «что касается возбужденных состояний таких кристаллов (особенно при низких температурах), то их определить очень сложно» [179]. Поэтому в отличие от квантовых систем многих тел со слабым взаимодействием определение понятия элементарных возбуждений для сильно связанных электронов с сильной межэлектронной корреляцией весьма нетривиально и потребовало специальных детальных исследований [20, 22–26]. Вместе с тем необходимо учитывать, что в реальных системах, к которым применяются модели Андерсона и Хаббарда, реализуются случаи сильной и слабой межэлектронной корреляции. Часто весьма важную роль играет взаимодействие электронов с колебаниями решетки — фононами [180–182]. Поэтому потребовалось построение последовательной самосогласованной теории электронной корреляции в широком интервале значений характерных параметров модели, а также соответствующей теории электрон-фононного взаимодействия в рамках модифицированного приближения сильно связанных электронов в различных предельных случаях [183, 184]. Это позволило также исследовать электропроводность [185, 186] и сверхпроводимость [187, 188] в переходных металлах и их разупорядоченных сплавах.

4.2. Модели Андерсона и Хаббарда. Гамильтониан однопримесной модели Андерсона [26, 162, 163] записывается в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{0\sigma} f_{0\sigma}^\dagger f_{0\sigma} + U/2 \sum_{\sigma} n_{0\sigma} n_{0-\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k (c_{k\sigma}^\dagger f_{0\sigma} + f_{0\sigma}^\dagger c_{k\sigma}). \quad (16)$$

Здесь $c_{k\sigma}^\dagger$ и $f_{0\sigma}^\dagger$ — операторы рождения для электронов проводимости и локализованных электронов примеси соответственно; ϵ_k — энергия электронов проводимости; $E_{0\sigma}$ — энергетический уровень локализованных электронов примеси; U есть внутриатомное кулоновское взаимодействие электронов в примесном узле; V_k представляет s – f -гибридизацию. Можно обобщить гамильтониан однопримесной модели Андерсона на периодический случай:

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} E_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U/2 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} + \sum_{kj\sigma} V_{kj} (c_{k\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger c_{k\sigma}). \quad (17)$$

Этот гамильтониан называется периодической *моделью Андерсона*.

Гамильтониан модели Хаббарда [164] имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U/2 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}. \quad (18)$$

Данный гамильтониан включает в себя кулоновское внутриатомное отталкивание U в одном узле и одноэлектронную энергию перескоков с узла на узел t_{ij} . Вследствие электронной корреляции электроны стремятся «избегать один другого». Их состояния наилучшим образом моделируются атомоподобными волновыми функциями Ванье $[\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)]$. Гамильтониан модели Хаббарда можно характеризовать двумя основными параметрами: U и эффективной шириной зоны сильно связанных электронов

$$\Delta = \left(N^{-1} \sum_{ij} |t_{ij}|^2 \right)^{1/2}.$$

Зонная энергия блоховских электронов $\epsilon(\mathbf{k})$ имеет вид

$$\epsilon(\mathbf{k}) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} t_{ij} \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)],$$

где N — число узлов решетки. Параметр $\gamma = \Delta/U$ характеризует два предельных режима, *зонный* ($\gamma \gg 1$) и *атомный* ($\gamma \rightarrow 0$), которые представляют особый интерес.

Заметим, что однозонная модель Хаббарда (18) является частным случаем более общей модели, которая учитывает вырождение d -электронов. В этом случае вторичное квантование строится на основе функций Ванье вида $[\phi_\lambda(r - R_i)]$, где λ есть зонный индекс ($\lambda = 1, 2, \dots, 5$). Гамильтониан системы электронов будет иметь вид

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\mu\nu\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} a_{i\mu\sigma}^\dagger a_{j\nu\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ij, mn} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\sigma\sigma'} \langle i\alpha, j\beta | W | m\gamma, n\delta \rangle a_{i\alpha\sigma}^\dagger a_{j\beta\sigma'}^\dagger a_{m\gamma\sigma'} a_{n\delta\sigma}. \quad (19)$$

Этот гамильтониан можно представить в следующем виде:

$$\mathcal{H} = H_1 + H_2 + H_3. \quad (20)$$

Первый член представляет собой энергию кинетического движения электронов

$$H_1 = \sum_{ij} \sum_{\mu\nu\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} a_{i\mu\sigma}^\dagger a_{j\nu\sigma}. \quad (21)$$

Второй член H_2 описывает одноцентровые члены кулоновского взаимодействия:

$$\begin{aligned}
 H_2 = & \frac{1}{2} \sum_{i\mu\sigma} U_{\mu\mu} n_{i\mu\sigma} n_{i\mu-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\mu\nu} \sum_{\sigma\sigma'} V_{\mu\nu} n_{i\mu\sigma} n_{i\nu\sigma'} (1 - \delta_{\mu\nu}) - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{i\mu\nu\sigma} I_{\mu\nu} n_{i\mu\sigma} n_{i\nu\sigma} (1 - \delta_{\mu\nu}) + \frac{1}{2} \sum_{i\mu\nu\sigma} I_{\mu\nu} a_{i\mu\sigma}^\dagger a_{i\mu-\sigma}^\dagger a_{i\nu-\sigma} a_{i\nu\sigma} (1 - \delta_{\mu\nu}) - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{i\mu\nu\sigma} I_{\mu\nu} a_{i\mu\sigma}^\dagger a_{i\mu-\sigma}^\dagger a_{i\nu-\sigma} a_{i\nu\sigma} (1 - \delta_{\mu\nu}). \quad (22)
 \end{aligned}$$

Помимо одноузельного интеграла отталкивания $U_{\mu\mu}$, который есть в однозонной модели Хаббарда, имеются еще три дополнительных вклада межорбитального взаимодействия. Последний член H_3 описывает прямое междуузельное обменное взаимодействие:

$$H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{ij\mu} \sum_{\sigma\sigma'} J_{ij}^{\mu\mu} a_{i\mu\sigma}^\dagger a_{i\mu-\sigma'}^\dagger a_{j\mu\sigma'} a_{j\mu\sigma}. \quad (23)$$

Обычно предполагается, что

$$U_{\mu\mu} = U; \quad V_{\mu\nu} = V; \quad I_{\mu\nu} = I; \quad J_{ij}^{\mu\mu} = J_{ij}. \quad (24)$$

Необходимо подчеркнуть, что модель Хаббарда теснейшим образом связана с *принципом Паули*, который в данном случае записывается как $n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma}$. Таким образом, обе модели, Андерсона и Хаббарда, наглядно демонстрируют проявление коллективизированного (зонного) и локализованного поведения электронов. Вопрос о соотношении между коллективизированным и локализованным описанием электронов в переходных и редкоземельных металлах и их соединениях тесно связан с другой фундаментальной проблемой. Речь идет об адекватности простой однозонной модели Хаббарда, в которой не учтено взаимодействие, отвечающее правилу Хунда, и орбитальное вырождение, для описания магнитных свойств вещества и ряда других свойств. Поэтому большой интерес представляет изучение различных обобщений моделей Андерсона и Хаббарда. В ряде работ [18, 19, 189] нами было отмечено, что различие между моделями наиболее отчетливо проявляется при рассмотрении их динамических, а не статических характеристик. Поэтому особый интерес представляют реакция системы на внешние поля и спектры возбужденных квазичастичных состояний. Включение добавочных членов в модельные гамильтонианы Андерсона и Хаббарда приводит к существенному усложнению их квазичастичного спектра за счет возникновения новых ветвей возбуждений, особенно в оптическом диапазоне [18, 19, 189].

4.3. s - d -обменная модель и модель Зенера. Большой интерес представляет собой обобщенная спин-фермионная модель (которую также называют моделью Зенера или s - d - (d - f -) моделью).

Гамильтониан s - d -обменной модели [55] имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = H_s + H_{s-d}, \quad (25)$$

$$H_s = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} H_{s-d} &= J \boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{S}_i = \\ &= -JN^{-1/2} \sum_{kk'} \left(c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} S^- + c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} S^+ + (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) S^z \right). \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $c_{k\sigma}^\dagger$ и $c_{k\sigma}$ — операторы вторичного квантования рождения и уничтожения для электронов проводимости. Гамильтониан (25) описывает взаимодействие локализованного спина примесного атома \mathbf{S}_i с подсистемой электронов проводимости основного металла. Данная модель лежит в основе описания эффекта Кондо, связанного с аномальным поведением электропроводности металлов, содержащих малое количество примеси переходного металла [55, 190–192].

Представляет интерес рассмотрение обобщенной спин-фермионной модели, применимой для описания более широкого круга веществ [55, 191, 193]. Гамильтониан обобщенной спин-фермионной d - f -модели [193] имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = H_d + H_{d-f}, \quad (28)$$

$$H_d = \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U n_{i\sigma} n_{i-\sigma}. \quad (29)$$

Оператор H_{d-f} описывает взаимодействие подсистемы сильно локализованных $4f(5f)$ -электронов со спиновой плотностью коллективизированных d -электронов:

$$H_{d-f} = \sum_i J \boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{S}_i = -JN^{-1/2} \sum_{kq} \sum_{\sigma} [S_{-q}^{-\sigma} a_{k\sigma}^\dagger a_{k+q-\sigma} + z_{\sigma} S_{-q}^z a_{k\sigma}^\dagger a_{k+q\sigma}]. \quad (30)$$

Знаковый фактор z_{σ} , введенный для удобства, равен:

$$z_{\sigma} = (+, -); -\sigma = (\uparrow, \downarrow); \quad S_{-q}^{-\sigma} = \begin{cases} S_{-q}^{-}, & -\sigma = +, \\ S_{-q}^{+}, & -\sigma = -. \end{cases} \quad (31)$$

В общем случае интеграл косвенного обмена J существенно зависит от волнового вектора $J(\mathbf{k}; \mathbf{k} + \mathbf{q})$ и имеет максимальное значение в точке $k = q = 0$. Заметим, что электроны проводимости s -зоны металла также принимаются во внимание; их роль состоит в перенормировке параметров за счет эффектов экранирования и т. п. Отметим, что гамильтониан s - d -модели является

низкоэнергетической реализацией модели Андерсона, что следует из применения к последней канонического преобразования Шриффера–Вольфа [55, 192, 194, 195].

4.4. Модель Фаликова–Кимбалла. В 1969 г. Фаликов и Кимбалл [196] предложили, по их словам, «простую» модель для описания перехода металл–изолятор в соединениях редкоземельных металлов. Эта модель описывает две подсистемы, а именно зонные и локализованные электроны и их взаимодействие между собой. Гамильтониан модели Фаликова–Кимбалла [196] имеет вид

$$\mathcal{H} = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (32)$$

где

$$H_0 = \sum_k \sum_{\nu\sigma} \epsilon_\nu(\mathbf{k}) a_{\nu k\sigma}^\dagger a_{\nu k\sigma} + \sum_i \sum_\sigma E b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}. \quad (33)$$

Здесь $a_{\nu k\sigma}^\dagger$ — оператор рождения электрона в состоянии с импульсом \mathbf{k} и спином σ , принадлежащем зоне ν , и $b_{i\sigma}^\dagger$ — оператор рождения электрона (дырки) в состоянии Ванье в узле решетки \mathbf{R}_i со спином σ . Энергии $\epsilon_\nu(\mathbf{k})$ и E положительны и таковы, что $\min[E + \epsilon_\nu(\mathbf{k})] > 0$. Предполагается, что вследствие эффектов экранирования только внутриатомные взаимодействия играют заметную роль. Фаликов и Кимбалл [196] учитывали 6 различных типов внутриатомного взаимодействия с 6 различными интегралами взаимодействия G_i . В упрощенном приближении среднего поля гамильтониан модели (32) сводился к виду

$$\mathcal{H} = N[\epsilon n_a + E n_b - G n_a n_b], \quad (34)$$

где $n_b = N^{-1} \sum_{i\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}$. Затем вычислялась свободная энергия системы и исследовался фазовый переход первого рода полупроводник–металл.

Модель Фаликова–Кимбалла и ее различные модификации и обобщения получили широкое распространение [197–203] при исследовании различных аспектов теории фазовых переходов и, прежде всего, перехода металл–изолятор. Она применялась также для исследования соединений с переменной валентностью и физики кристаллизации. В последнее время модель Фаликова–Кимбалла применялась для изучения электронного сегнетоэлектричества (EFE) [204]. Оказалось также, что поведение целого ряда веществ можно описать в рамках данной модели. К ним относятся, например, соединения YbInCu_4 , $\text{EuNi}_2(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_2$, NiI_2 , Ta_xN . Таким образом, модель Фаликова–Кимбалла является статистической моделью перехода металл–изолятор; при этом она также исходит из двойственного, зонно-атомного поведения электронов. Несмотря на свою кажущуюся простоту, эта модель, как и модель Хаббарда, именно по этой причине весьма сложна и продолжает интенсивно изучаться [197–203].

4.5. Адекватность модельного описания. Как видно, гамильтонианы s - d - и d - f -моделей особенно наглядно демонстрируют проявление коллективизированного (зонного) и локализованного поведения электронов. Модели Андерсона, Хаббарда, Фаликова–Кимбалла и спин-фермионная модель широко применяются для описания различных свойств соединений переходных и редкоземельных металлов [18, 19, 21, 22, 24–26, 193, 205–208]. В частности, они применяются для описания широкого круга явлений в теории хемосорбции [209], поверхностного магнетизма, теории квантовой диффузии в твердом ^3He , описания движения вакансий в квантовых кристаллах и свойств систем с тяжелыми фермионами [55, 192, 195, 210, 211] — весьма интересной и все еще не решенной проблемы физики конденсированного состояния вещества. Поэтому развитие последовательной теории корреляционных эффектов и описание многочастичной динамики моделей (16)–(18), (25), (28) представляло и представляет большой интерес и с этой точки зрения. Все указанные выше модели являются различными способами, *языками* описания. Они по-разному отвечают на вопрос: как и насколько изменяются волновые функции бывших валентных электронов, насколько они делокализуются. С этим связана их различная применимость для конкретных случаев. В целом же использование упомянутых моделей (и их комбинаций) позволяет описать очень широкий круг явлений и получать качественные, а часто и количественные правильные результаты. Иногда (не всегда) очень сложные и трудоемкие расчеты электронной зонной структуры практически не добавляют чего-то существенного по сравнению с результатами, полученными на основе указанных схематических и грубых моделей.

При изучении конкретных веществ — переходных и редкоземельных металлов и их соединений, актинидов, урановых соединений, магнитных полупроводников, лантан-магниевого перовскитов и т. д. — привлекается, в той или иной степени, большинство описанных выше модельных представлений (или их комбинации). Это отражает то обстоятельство, что электронные состояния, интересующие нас, носят двойственный — *коллективизированный* и *локализованный* — характер и не допускают однозначного описания. Еще Херринг [212] в 1960 г. в работе о состоянии d -электронов в переходных металлах подчеркивал необходимость «коктейля» различных описаний. Вот почему усилия многих исследователей направлены на создание *синтетических* моделей, учитывающих двойственную *зонно-атомную* природу в переходных и редкоземельных металлах и их соединениях. Не случайно Э. Либ [170] высказал следующее утверждение: «Поиски модельного гамильтониана для коллективизированных электронов, который бы правильно описывал ферромагнитные свойства, являются одной из основных проблем статистической механики и по важности могут сравниться с таким недавним широко известным достижением, как доказательство существования объемной свободной энергии для макроскопически больших систем» (см.

также [172, 213, 214]). Решение этой проблемы является частью более общей задачи единого квантово-статистического описания электрических, магнитных и сверхпроводящих свойств переходных и редкоземельных металлов, их сплавов и соединений. В самом деле, двойственный, зонно-атомный характер d - и, частично, f -состояний приводит к особенностям в поведении и описании не только магнитных свойств, но и сверхпроводимости, а также процессов электро- и теплопроводности.

Нобелевский лауреат К. Дж. Вильсон заметил, что «есть много проблем в науке, характеризующихся тем, что за макроскопическими эффектами стоит сложное микроскопическое поведение» [215] (см. также [216, 217]). Через 80 лет после формулировки модели Гейзенберга (1928 г.) мы все еще не имеем полной и последовательной теории, позволяющей однозначно ответить на вопрос: почему железо магнитно? [218]. Хотя за истекшие десятилетия физика магнитных явлений превратилась в очень обширную и разветвленную область современной физической науки и многие сложные процессы, происходящие в веществах с магнитным порядком, получили удовлетворительное объяснение, тем не менее исследования последних лет показали, что многое еще остается неясным. Описанные выше модельные гамильтонианы призваны дать понимание (хотя и схематическое) основных особенностей интересующих нас аспектов поведения реальных систем. При этом нужно подчеркнуть, что два способа описания состояний электронов — коллективизированный и локализованный — не противоречат друг другу, а скорее являются *дополнительными* способами квантово-механического описания состояния электронов в реальных переходных и редкоземельных металлах и их соединениях. В определенном смысле все описанные выше модельные гамильтонианы можно рассматривать как некоторое специальное усложнение гамильтониана Хаббарда, включающее в рассмотрение дополнительные подсистемы кристалла и их взаимодействие между собой. Разнообразие моделей отражает многообразие интересующих нас аспектов поведения магнитных, электрических и сверхпроводящих свойств вещества. Подчеркнем, что *построение физических моделей* является одной из самых неотъемлемых черт теоретической физики [93]. По словам Пайерлса, «разные модели служат совершенно различным целям, и соответственно с этим меняется их природа. . . Общим элементом для всех этих разных типов моделей служит то, что они помогают нам более ясно представить существо физических проблем путем анализа упрощенных ситуаций, более доступных нашей интуиции. Эти модели служат ступеньками на пути к рациональному объяснению реальной действительности. . . Мы можем взять эти модели в руки и повернуть другой стороной и наверняка получим более ясное представление об их форме и структуре, чем из вида реальных объектов» [93]. Развитие физики магнитных явлений [157, 219, 220] доказывает этот вывод самым убедительным образом.

5. ТЕОРИЯ СИСТЕМ МНОГИХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

Исследовательская программа, получившая впоследствии название *теория систем многих взаимодействующих частиц*, начала особенно интенсивно развиваться в конце 1950-х – начале 1960-х гг. [221]. Усилиями многих исследователей: Ф. Блоха, Г. Фрелиха, Дж. Бардина, Н. Н. Боголюбова, Г. Гугенгольца, Л. Ван Хова, Д. Пайнса, К. Бракнера, Р. Фейнмана, М. Гелл-Мана, Ф. Дайсона, Р. Кубо, Д. тер Хаара и мн. др. — эта теория достигла существенных успехов в решении многих трудных проблем физики конденсированного состояния вещества [222–225]. О некоторых аспектах развития теории систем многих взаимодействующих частиц и ее приложениях к физике твердого тела увлекательно рассказывается в книге [226]. Долгое время основным методом теоретического исследования систем многих взаимодействующих частиц оставалась теория возмущений (в самых разных ее формулировках). При этом полный гамильтониан системы \mathcal{H} представлялся в виде суммы двух частей — гамильтониана системы невзаимодействующих частиц и слабого возмущения:

$$\mathcal{H} = H_0 + V. \quad (35)$$

В целом ряде практически важных случаев такой подход был удовлетворительным и работоспособным. Теория систем многих частиц нашла широкое применение к конкретным проблемам, например, к твердому телу, плазме, теории сверхтекучего гелия, тяжелым ядрам и т. д. Именно интенсивное развитие теории систем многих частиц привело в том числе к построению микроскопической теории сверхпроводимости [227, 228]. Причем эта теория, быть может впервые, получила также глубокое математическое обоснование [229–231]. Развитие теории систем многих частиц привело к тому, что многие методы квантовой теории поля были адаптированы для задач статистической механики. К ним относятся метод функций Грина [232–235] и диаграммная техника [236]. Однако с расширением круга изучаемых систем все более настоятельно ощущалась необходимость выхода за рамки теории возмущений. В особенности это стало настоятельной потребностью при теоретическом описании переходных и редкоземельных металлов и их соединений, переходов металл–изолятор [237], задач квантовой теории магнетизма и т. п. Эта потребность выхода за рамки теории возмущений ощущалась и самими создателями метода функций Грина. Еще в 1951 г. Дж. Швингер писал [232]: «... весьма желательно избежать обоснования формальной теории функций Грина на том ограниченном базисе, который следует из предположения о возможности разложения по степеням константы связи». Поскольку важнейшим аспектом теории систем многих взаимодействующих частиц является адекватный и точный учет именно *взаимодействия*, которое может изменить (иногда весьма существенно) характер поведения системы по сравнению

со случаем невзаимодействующих частиц, это замечание Дж. Швингера представляется весьма дальновидным. Интересно заметить, что Н. Н. Боголюбов, по-видимому, признавая особую роль Дж. Швингера в создании метода функций Грина, в своей работе [238] использует термин *функции Грина–Швингера* (см. интересный анализ генезиса метода функций Грина в работе [239]; см. также книгу [240]).

Что же касается применения метода функций Грина к задачам статистической физики, то здесь существенное продвижение было достигнуто в результате переформулировки исходного метода в виде создания метода двухвременных температурных функций Грина.

5.1. Двухвременные температурные функции Грина. Опережающие и запаздывающие двухвременные температурные функции Грина (ФГ) в статистической механике квантовых систем были введены Н. Н. Боголюбовым и С. В. Тябликовым [241]. В отличие от причинных ФГ они могут быть продолжены в комплексную плоскость. Эти удобные аналитические свойства способствовали тому, что метод двухвременных температурных ФГ получил широкое распространение в статистической механике [4, 16, 241–244]. Для нахождения запаздывающих и опережающих ФГ используют систему зацепляющихся уравнений движения вместе с соответствующими спектральными представлениями.

Рассмотрим многочастичную систему с гамильтонианом $\mathcal{H} = H - \mu N$; здесь μ — химический потенциал, N — оператор полного числа частиц. Если $A(t)$ и $B(t')$ — некоторые операторы, относящиеся к рассматриваемой системе, то их зависимость от времени в гейзенберговском представлении будет иметь вид

$$A(t) = \exp\left(\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) A(0) \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}t}{\hbar}\right). \quad (36)$$

Двухвременная корреляционная функция определяется следующим образом:

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \text{Tr}(\rho A(t)B(t')), \quad \rho = Z^{-1} \exp(-\beta\mathcal{H}).$$

Эта корреляционная функция имеет свойство

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= Z^{-1} \text{Tr} \left(\exp(-\beta\mathcal{H}) \exp\left(\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) \times \right. \\ &\quad \left. \times A(0) \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}\right) B(0) \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}t'}{\hbar}\right) \right) = \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left(\exp(-\beta\mathcal{H}) \exp\left(\frac{i\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}\right) A(0) \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}\right) B(0) \right) = \\ &= \langle A(t-t')B(0) \rangle = \langle A(0)B(t'-t) \rangle. \quad (37) \end{aligned}$$

Обычно удобнее использовать для сокращения записи обозначения $\langle A(t)B \rangle$ и $\langle BA(t) \rangle$, где $t - t' = t$. Эти две корреляционные функции связаны между собой благодаря следующему свойству:

$$-\beta\mathcal{H} + \frac{i\mathcal{H}t}{\hbar} = \frac{i\mathcal{H}(t + i\hbar\beta)}{\hbar}. \quad (38)$$

В результате получим

$$\begin{aligned} \langle A(t)B \rangle &= \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left(\exp(-\beta\mathcal{H}) \exp\left(\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) A \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) \exp(\beta\mathcal{H}) \exp(-\beta\mathcal{H}) B \right) = \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left(\exp(-\beta\mathcal{H}) B \exp\left(\frac{i\mathcal{H}(t + i\hbar\beta)}{\hbar}\right) A \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t + i\hbar\beta)}{\hbar}\right) \right) = \\ &= \langle BA(t + i\hbar\beta) \rangle. \quad (39) \end{aligned}$$

Возможно рассматривать корреляционную функцию $\langle BA(t) \rangle$ в качестве основной, поскольку для того, чтобы получить функцию $\langle A(t)B \rangle$, достаточно заменить переменную $t \rightarrow t_1 = t + i\hbar\beta$ в $\langle BA(t) \rangle$.

Спектральное представление (преобразование Фурье для ω) функции $\langle BA(t) \rangle$ определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle BA(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\omega t\right] J(B, A; \omega), \quad (40) \\ J(B, A; \omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\left[\frac{i}{\hbar}\omega t\right] \langle BA(t) \rangle. \end{aligned}$$

Выражение (40) есть *спектральное представление* соответствующей временной корреляционной функции. Величины $J(B, A; \omega)$ и $J(A, B; \omega)$ есть *спектральные плотности* (или спектральные интенсивности). Удобно считать, что $\omega = \hbar\omega_{\text{clas}}$, где ω_{clas} есть классическая круговая частота.

Временная корреляционная функция может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \langle BA(t) \rangle &= \\ &= Z^{-1} \sum_{nml} \langle n|B|m \rangle \langle m| \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right] A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right] |l \rangle \langle l| \exp(-\beta\mathcal{H}) |n \rangle = \\ &= Z^{-1} \sum_{nm} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \exp(-\beta\epsilon_n) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\epsilon_n - \epsilon_m)t\right), \quad (41) \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{H}|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle, \quad \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right]|n\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right)|n\rangle.$$

Поэтому, принимая во внимание, что

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\epsilon_n - \epsilon_m - \omega)t\right] = \delta(\epsilon_n - \epsilon_m - \omega), \quad (42)$$

получим

$$J(B, A; \omega) = Z^{-1} \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \exp(-\beta\epsilon_n) \delta(\epsilon_n - \epsilon_m - \omega). \quad (43)$$

В результате преобразование Фурье для временной корреляционной функции примет вид

$$\begin{aligned} \langle A(t)B \rangle = \langle AB(-t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp\left[\frac{i}{\hbar}\omega t\right] J(A, B; \omega) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(A, B; -\omega) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\omega t\right], \end{aligned} \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned} J(A, B; -\omega) &= Z^{-1} \sum_{nm} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \exp(-\beta\epsilon_m) \delta(\epsilon_m - \epsilon_n + \omega) = \\ &= Z^{-1} \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \exp(-\beta\epsilon_n) \delta(\epsilon_n - \epsilon_m - \omega) \exp(\beta\omega). \end{aligned} \quad (45)$$

Легко видеть, что имеет место равенство

$$J(A, B; -\omega) = \exp(\beta\omega) J(B, A; \omega). \quad (46)$$

Для спектральной плотности корреляционной функции более высокого порядка $\langle B[A(t), \mathcal{H}]_- \rangle$ получим

$$\begin{aligned} J(B, [A, \mathcal{H}]_-; \omega) &= \omega J(B, A; \omega), \\ \omega J(A, B; \omega) &= J(A, [\mathcal{H}, B]_-; \omega) = J([A, \mathcal{H}]_-, B; \omega), \end{aligned} \quad (47)$$

.....

Рассмотрим теперь ФГ следующего вида: запаздывающего, опережающего и причинного:

$$G^r(A, B; t - t') = \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle^r = -i\theta(t - t')\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle, \quad \eta = \pm, \quad (48)$$

$$G^a(A, B; t - t') = \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle^a = i\theta(t' - t)\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle, \quad \eta = \pm, \quad (49)$$

$$\begin{aligned} G^c(A, B; t - t') &= \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle^c = iT\langle A(t)B(t') \rangle = \\ &= i\theta(t - t')\langle A(t)B(t') \rangle + \eta i\theta(t' - t)\langle B(t')A(t) \rangle, \quad \eta = \pm. \end{aligned} \quad (50)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ есть среднее по большому каноническому ансамблю; $\theta(t)$ — ступенчатая функция; квадратные скобки обозначают коммутатор или антикоммутатор ($\eta = \pm$):

$$[A, B]_{-\eta} = AB - \eta BA. \quad (51)$$

Важным элементом при использовании ФГ является их временная эволюция. Для этого нужно продифференцировать ФГ по одному из ее аргументов, например по первому времени t . Мы будем иметь следующее *уравнение движения* (equation-of-motion):

$$id/dtG^{\alpha}(t, t') = \delta(t - t')\langle[A, B]_{\eta}\rangle + \langle\langle[A, \mathcal{H}]_{-}(t), B(t')\rangle\rangle^{\alpha}. \quad (52)$$

Здесь верхний индекс $\alpha = r, a, c$ определяет тип ФГ: запаздывающий, опережающий или причинный. Поскольку это дифференциальное уравнение содержит неоднородную часть с δ -функцией, оно по форме и структуре подобно обычному уравнению для функции Грина в теории дифференциальных уравнений [245] (см. подробную статью [246] о творчестве Джорджа Грина (1793–1841)). Именно это обстоятельство позволяет использовать термин *функция Грина* для сложного объекта вида (48)–(50). Следует подчеркнуть, что уравнения движения для всех трех ФГ, запаздывающей, опережающей и причинной, имеют одинаковую функциональную форму. Различными являются граничные условия по времени t . Характерной чертой всех уравнений движения является присутствие в правой части ФГ более высокого порядка, чем исходная. Для ее нахождения необходимо также составить соответствующее уравнение движения для ФГ $\langle\langle[A, \mathcal{H}](t), B(t')\rangle\rangle$. Последовательная запись таких уравнений движения составляет *цепочку зацепляющихся уравнений движения для ФГ*. В принципе, можно записать бесконечное число таких уравнений движения:

$$\begin{aligned} (i)^n d^n / dt^n G(t, t') &= \sum_{k=1}^n (i)^{n-k} d^{n-k} / dt^{n-k} \delta(t - t') \langle\langle[\dots [A, \underbrace{\mathcal{H} \dots \mathcal{H}}_{k-1}], B]_{\eta}\rangle\rangle + \\ &+ \langle\langle[\dots [A, \underbrace{\mathcal{H}]_{-} \dots \mathcal{H}]_{-}(t), B(t')\rangle\rangle. \end{aligned} \quad (53)$$

Бесконечная цепочка зацепляющихся уравнений движения для ФГ является видимым проявлением *взаимодействия* в многочастичной системе. Она отражает тот факт, что ни одна частица (или группа взаимодействующих частиц) не может двигаться независимо от остальной системы.

Следующей задачей является решение дифференциального уравнения движения для ФГ. Для этого используется преобразование Фурье по времени, а также соответствующие граничные условия, отвечающие требованиям рассматриваемой проблемы. Спектральное представление для ФГ, обобщающее уравнения (40)–(43), имеет следующий вид:

$$G^r(A, B; t - t') = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dE G(A, B; E) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t') \right], \quad (54)$$

$$G(A, B; E) = \langle \langle A|B \rangle \rangle_E = \int_{-\infty}^{\infty} dt G(A, B; t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} Et \right). \quad (55)$$

Подставляя выражение (54) в уравнения (52) и (53), найдем

$$EG(A, B; E) = -\langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A, \mathcal{H}]_- | B \rangle \rangle_E; \quad (56)$$

$$E^n G(A, B; E) = - \sum_{k=1}^n E^{n-k} \langle \langle [\dots [A, \underbrace{\mathcal{H} \dots \mathcal{H}}_{k-1}], B]_{\eta} \rangle \rangle + \langle \langle [\dots [A, \underbrace{\mathcal{H}]_- \dots \mathcal{H}]_-}_n | B \rangle \rangle_E. \quad (57)$$

Цепочка зацепляющихся уравнений движения для ФГ (57) является чрезвычайно сложным и нетривиальным объектом исследования. Часто удобно представить ту же самую цепочку зацепляющихся уравнений движения для ФГ, используя для этого дифференцирование по *второму времени* t' . При этом соответствующие уравнения движения, являющиеся аналогом уравнений (56) и (57), запишутся в виде

$$-EG(A, B; E) = -\langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle \langle A|[B, \mathcal{H}]_- \rangle \rangle_E; \quad (58)$$

$$(-1)^n E^n G(A, B; E) = - \sum_{k=1}^n (-1)^{n-k} E^{n-k} \langle \langle A, [\dots [B, \underbrace{\mathcal{H} \dots \mathcal{H}}_{k-1}]_{\eta} \rangle \rangle + \langle \langle A|[\dots [B, \underbrace{\mathcal{H}]_- \dots \mathcal{H}]_-}_n \rangle \rangle_E. \quad (59)$$

Основная проблема состоит в том, как искать решения цепочки зацепляющихся уравнений движения для ФГ: в виде (57) или в виде (59)? Для того, чтобы подойти к решению этого сложного вопроса, необходимо обратиться к методу дисперсионных соотношений, который является весьма эффективным математическим формализмом, как это было показано в работах Н. Н. Боголюбова и сотрудников [4, 241, 242]. Метод запаздывающих и опережающих ФГ тесно связан с техникой дисперсионных соотношений [4], которая обеспечивает запись граничных условий в виде спектральных представлений для ФГ. Спектральные представления для корреляционных функций впервые были использованы в работе Каллена и Велтона [247] (см. также [248]), посвященной теории флуктуаций и статистической механике необратимых процессов. ФГ являются комбинацией корреляционных функций

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \langle A(t-t')B \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp\left[\frac{i}{\hbar}\omega t\right] J(A, B; \omega), \quad (60)$$

$$F_{BA}(t'-t) = \langle B(t')A(t) \rangle = \langle BA(t-t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\omega t\right] J(B, A; \omega). \quad (61)$$

Поэтому спектральные представления для двухвременных температурных функций Грина запишутся в виде

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(B, A; \omega)(\exp(\beta\omega) - \eta)}{\mathcal{E} - \omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{\mathcal{E} - \omega}, \quad (62)$$

где

$$J'(B, A; \omega) = (\exp(\beta\omega) - \eta)J(B, A; \omega) \quad (63)$$

и \mathcal{E} есть комплексная энергия $\mathcal{E} = \text{Re } \mathcal{E} + i\text{Im } \mathcal{E}$.

Из этого следует, что

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (J(B, A; \omega) \exp(\beta\omega) - \eta J(B, A; \omega)) &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (J(B, A; -\omega) - \eta J(B, A; \omega)) = \langle AB - \eta BA \rangle. \end{aligned} \quad (64)$$

В результате приходим к уравнению

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle AB - \eta BA \rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]_- | B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}. \quad (65)$$

Следует отметить, что двухвременные температурные функции Грина не определены для $t = t'$; кроме того, $\langle\langle A(t)B(t') \rangle\rangle^r = 0$ для $t < t'$ и $\langle\langle A(t)B(t') \rangle\rangle^a = 0$ для $t > t'$. Используем выражение для $\theta(t)$:

$$\theta(t) = \exp(-\varepsilon t)(\varepsilon \rightarrow 0, \varepsilon > 0), \quad t > 0; \quad \theta(t) = 0, \quad t < 0. \quad (66)$$

В результате преобразование Фурье запаздывающей (опережающей) ФГ примет вид

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E \pm i\varepsilon} = G^{r(a)}(A, B; E). \quad (67)$$

Ясно, что две функции, $G^r(A, B; E)$ и $G^a(A, B; E)$, являются функциями реального аргумента E ; они определены как предельные значения функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ в верхней и нижней полуплоскости соответственно. Согласно теореме Боголюбова–Парасюка [16, 241–243], функция

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(B, A; \omega)(\exp(\beta\omega) - \eta)}{\mathcal{E} - \omega} \quad (68)$$

является аналитической функцией в комплексной \mathcal{E} -плоскости; эта функция равна $G^r(A, B; E)$ везде в верхней полуплоскости и $G^a(A, B; E)$ везде в нижней полуплоскости. Она имеет особенности на реальной оси, поэтому необходимо ввести разрез вдоль реальной оси. Заметим, что $G^{r(a)}(A, B; t)$ является обобщенной функцией в смысле Соболева–Шварца [16, 241–243]. В результате разреза вдоль реальной оси функция $G(A, B; \mathcal{E})$ является аналитической функцией, состоящей из двух ветвей, одна из которых определена в верхней полуплоскости, а другая — в нижней полуплоскости для комплексных значений \mathcal{E} :

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \begin{cases} G^r(A, B; \mathcal{E}), & \text{если } \mathcal{E} > 0, \\ G^a(A, B; \mathcal{E}), & \text{если } \mathcal{E} < 0. \end{cases} \quad (69)$$

Соответствующие преобразования Фурье примут вид

$$\begin{aligned} G^{r(a)}(A, B; t) &= (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G^{r(a)}(A, B; E) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right] = \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega \pm i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (70)$$

Здесь $J'(B, A; \omega)$ может быть выражено как ($\varepsilon \rightarrow 0$)

$$J'(B, A; \omega) = -\frac{1}{2\pi i} (\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} - \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon}). \quad (71)$$

В результате спектральные представления для запаздывающей и опережающей ФГ будут определяться следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} G^r(A, B; E) &= \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}^r = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{E - \omega + i\varepsilon} J'(B, A; \omega) = \\ &= P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega} - i\pi J'(B, A; E), \quad (72) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G^a(A, B; E) &= \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon}^a = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon} J'(B, A; \omega) = \\ &= P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega} + i\pi J'(B, A; E). \quad (73) \end{aligned}$$

При выводе этих уравнений использовалось соотношение [16, 241–243]

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} \rightarrow P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x). \quad (74)$$

Здесь $P(1/x)$ указывает, что при интегрировании берется главная часть интеграла. В результате получаем основополагающее уравнение для спектральной плотности

$$J(B, A; E) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{G^r(A, B; E) - G^a(A, B; E)}{\exp(\beta E) - \eta}. \quad (75)$$

Отсюда видно, что, зная функцию Грина $G^{r(a)}(A, B; E)$, мы можем вычислить $J(B, A; E)$ и исходя из этого найти корреляционную функцию. С помощью соотношения (75) можно получить следующие дисперсионные соотношения:

$$\operatorname{Re} G^{r(a)}(A, B; E) = \mp \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\operatorname{Im} G^{r(a)}(A, B; E)}{E - \omega}. \quad (76)$$

Наиболее важным практическим следствием спектральных представлений для запаздывающей и опережающей ФГ является так называемая *спектраль-*

ная теорема:

$$\begin{aligned} \langle B(t')A(t) \rangle &= \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp \left[\frac{i}{\hbar} E(t-t') \right] [\exp(\beta E) - \eta]^{-1} \text{Im} G_{AB}(E + i\varepsilon), \quad (77) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp(\beta E) \exp \left[\frac{i}{\hbar} E(t-t') \right] [\exp(\beta E) - \eta]^{-1} \text{Im} G_{AB}(E + i\varepsilon). \quad (78) \end{aligned}$$

Выражения (77) и (78) имеют важнейшее значение для всего метода двухвременных температурных ФГ. Они позволяют установить связь статистических средних значений с фурье-образами функций Грина и составляют основу для практического применения всего формализма для решения конкретных задач [4, 16, 241–243].

5.2. Метод неприводимых функций Грина. При рассмотрении системы уравнений для ФГ основной проблемой является разработка приемов эффективного расщепления системы уравнений с целью получения замкнутых уравнений для определения ФГ. То, что такое приближение должно выбираться весьма индивидуально, в зависимости от характера задачи, иногда критикуют в работах, использующих причинные ФГ и диаграммную технику, за несистематичность. Однако при диаграммном подходе также имеет место неоднозначность при получении требуемого приближения, и решение вопроса о том, какие диаграммы надо просуммировать, очевидно только для небольшого круга относительно простых задач. В работах [249–252], посвященных бозе-системам, и в работах автора [20, 22–24, 26, 193, 253–255], посвященных ферми-системам, было показано, что для широкого круга разных задач статистической механики и теории конденсированных сред можно наметить достаточно систематический способ построения приближенных решений в рамках метода неприводимых функций Грина. В рамках этого подхода можно взглянуть с единой точки зрения на основные принципиальные вопросы, возникающие в методе двухвременных температурных ФГ. Метод неприводимых функций Грина является полезной переформулировкой обычного метода уравнений движения Боголюбова–Тябликова. Конструктивная идея состояла в том, что при расчете одночастичных характеристик системы (спектр квазичастичных возбуждений, плотность состояний и т. д.) удобно сначала представить ФГ (48) в виде формального решения уравнения Дайсона с тем, чтобы производить необходимые расщепления многочастичных корреляционных функций

в массовом операторе, поскольку при этом можно условно проконтролировать процедуру расщепления по аналогии с диаграммным подходом. Метод неприводимых функций Грина находится в тесной связи с методом проектирования Мори–Цванцига [256–262], который по существу является следствием идеи Н. Н. Боголюбова о *сокращенном описании* системы [263]. В этом подходе бесконечная цепочка зацепляющихся уравнений для корреляционных функций сводится к нескольким относительно простым уравнениям, в которых *эффективно* учитывается та существенная информация о системе, которая определяет специфику данной задачи. Необходимо подчеркнуть, что при использовании метода неприводимых ФГ структура получаемого решения существенно зависит от порядка уравнений для ФГ [20, 23], в которых производится выделение неприводимых частей. Это, в свою очередь, определяет характер тех приближенных решений, которые мы строим на основе точного представления.

Для того чтобы пояснить сказанное выше, рассмотрим уравнение движения (56) для запаздывающей ФГ (48) вида $\langle\langle A(t), A^\dagger(t') \rangle\rangle$:

$$\omega G(\omega) = \langle[A, A^\dagger]_\eta\rangle + \langle\langle[A, H]_- | A^\dagger\rangle\rangle_\omega. \quad (79)$$

Введем по определению *неприводимую* (ir) ФГ

$${}^{(ir)}\langle\langle[A, H]_- | A^\dagger\rangle\rangle = \langle\langle[A, H]_- - zA | A^\dagger\rangle\rangle. \quad (80)$$

Неизвестная постоянная z определяется из условия

$$\langle[{}^{(ir)}[A, H]_-, A^\dagger]_\eta\rangle = 0. \quad (81)$$

В определенном смысле условие (81) соответствует условиям ортогональности в формализме Мори [256–262]. Следует подчеркнуть, что совершенно эквивалентным образом вместо определения неприводимых частей ФГ $({}^{(ir)}\langle\langle[A, H]_- | A^\dagger\rangle\rangle)$ можно рассматривать *неприводимые операторы* $({}^{(ir)}[A, H]_-) \equiv ([A, H]_-)^{(ir)}$, поэтому мы будем использовать как обозначения $({}^{(ir)}\langle\langle A | B \rangle\rangle)$, так и $(\langle\langle (A)^{(ir)} | B \rangle\rangle)$ в зависимости от удобства и сокращения записи. Из уравнения (81) найдем

$$z = \frac{\langle\langle[A, H]_-, A^\dagger]_\eta\rangle}{\langle[A, A^\dagger]_\eta\rangle} = \frac{M_1}{M_0}. \quad (82)$$

Здесь M_0 и M_1 — нулевой и первый моменты спектральной плотности [16, 241–243]. Неприводимой называется такая функция Грина, которая не может быть сведена путем расщепления к ФГ более низкого порядка. В статистической физике хорошо известны неприводимые корреляционные функции (см., например, [257, 264]). В диаграммной технике [236] неприводимые вершины

являются совокупностью графиков, неразрезаемых по одной линии. Определение (80) переводит эти понятия на язык запаздывающих и опережающих функций Грина. Все ренормировки среднего поля, которые отделяются с помощью (80), относим к ФГ в обобщенном приближении среднего поля

$$G^0(\omega) = \frac{\langle [A, A^\dagger]_\eta \rangle}{(\omega - z)}. \quad (83)$$

Для расчета ФГ (80) $\langle \langle [A, H]_-(t), A^\dagger(t') \rangle \rangle$ используем прием дифференцирования по второму времени t' . В полученном уравнении также выделяем неприводимую часть по аналогии с (80). В результате получим

$$G(\omega) = G^0(\omega) + G^0(\omega)P(\omega)G^0(\omega). \quad (84)$$

Здесь введен оператор рассеяния

$$P = (M_0)^{-1}(\langle \langle [A, H]_-^{(ir)} | [A^\dagger, H]_-^{(ir)} \rangle \rangle)(M_0)^{-1}. \quad (85)$$

Структура уравнения (84) позволяет в полной аналогии с диаграммной техникой определить массовый оператор M :

$$P = M + MG^0P. \quad (86)$$

В результате получим точное уравнение Дайсона (никаких расщеплений пока не сделано) для двухвременных температурных ФГ:

$$G = G^0 + G^0MG. \quad (87)$$

Массовый оператор M (или оператор собственной энергии) выражается, согласно (86), через *собственную* (в диаграммной технике — *связанную*) часть многочастичной неприводимой ФГ и описывает процессы *неупругого* рассеяния, приводящие к затуханию и дополнительной перенормировке частоты самосогласованных квазичастичных возбуждений. Нужно отметить, что между P и M имеется весьма тонкое различие. Оба оператора являются различными решениями двух различных интегральных уравнений: (86) и (87). Однако только уравнение Дайсона (87) позволяет записать формальное решение для ФГ в следующем виде:

$$G = [(G^0)^{-1} - M]^{-1}. \quad (88)$$

Это важнейшее соотношение может рассматриваться как альтернативная форма уравнения Дайсона и как *определение* массового оператора при условии, что ФГ в обобщенном приближении среднего поля G^0 была определена соответствующим образом, исходя из равенства

$$G^0G^{-1} + G^0M = 1. \quad (89)$$

Напротив, оператор P не удовлетворяет равенству (89); вместо него необходимо записать

$$(G^0)^{-1} - G^{-1} = PG^0G^{-1}. \quad (90)$$

Таким образом, именно функциональная структура уравнения (88) определяет существенное различие между P и M . Если говорить совершенно строго, определение (86) носит символический характер; подразумевается, что благодаря одинаковому виду уравнений для ФГ всех трех типов (48)–(50) можно на каждом этапе вычислений перейти к причинным ФГ и подтвердить обоснованность определения (86). Поэтому следовало бы говорить об *аналоге* уравнения Дайсона. В дальнейшем эту оговорку будем опускать, поскольку это не приведет к недоразумению. Подчеркнем, что приведенный выше способ введения неприводимых частей ФГ (неприводимых операторов) является лишь общей схемой. Конкретный способ введения неприводимых частей ФГ зависит от вида операторов A , типа гамильтониана и условий задачи. Таким образом, вычисление полной ФГ свелось к нахождению ФГ в приближении обобщенного среднего поля и массового оператора. Существенным является то обстоятельство, что в данном подходе приближенные решения конструируются не через расщепление цепочки уравнений движения, а используется возможность подбирать функциональную форму массового оператора самосогласованным образом, т. е. искать приближения в виде $M \approx F[G]$. При этом сохраняется точная функциональная структура одночастичной ФГ (88), что является весьма существенным преимуществом по сравнению со стандартными схемами расщеплений.

5.3. Обобщенные средние поля. Впервые концепция среднего поля для системы многих частиц, по-видимому, была сформулирована (в неявном виде) в диссертации Ван дер Ваальса (1837–1923) «О непрерывности газообразного и жидкого состояния». Эта классическая работа была опубликована в 1874 г. и приобрела широкую известность [265]. Первоначально Ван дер Ваальс ожидал, что объемная поправка к уравнению состояния сведется к очевидному уменьшению доступного для молекулярного движения пространства на величину b , равную суммарному объему молекул. Однако ситуация оказалась намного сложнее. Необходимо было учесть обе поправки — объемную b и поправку к давлению a/V^2 , что приводило к уравнению Ван дер Ваальса [266]. Таким образом, Ван дер Ваальс понял, что «сфера действия сил притяжения содержит много соседних молекул». Развитие этого подхода привело к пониманию того, что сложное многочастичное поведение газов, жидкостей и твердых тел можно попытаться понять в терминах движения одной частицы в среднем (или эффективном) поле всех остальных частиц, рассматриваемом как некая однородная (или неоднородная) среда. Таким образом, многочастичное поведение сводилось к эффективному (или перенормированному) поведению одной частицы в среде (или поле). В дальнейшем эти идеи

были распространены на физику магнитных явлений. При этом магнетик рассматривался как некоторая своеобразная жидкость. Отсюда возникла терминология *магнитомягкие* и *магнито жесткие* материалы. Начиная с 1907 г. приближение молекулярного поля Вейсса [36] получило очень широкое распространение в теории магнитных явлений [37] и продолжает эффективно использоваться вплоть до настоящего времени [267]. И тем не менее еще в 1965 г. было замечено, что «теория молекулярного поля Вейсса играет таинственную роль в статистической механике магнетизма» [268]. Чтобы пояснить концепцию молекулярного поля на примере гейзенберговского ферромагнетика, нужно рассмотреть преобразование исходного многочастичного гамильтониана (12) в редуцированный одночастичный гамильтониан

$$\mathcal{H} = -2\mu_0\mu_B \mathbf{S} \cdot \mathbf{h}^{(\text{mf})}.$$

Это преобразование достигается с помощью тождества

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}' = \mathbf{S} \cdot \langle \mathbf{S}' \rangle + \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{S}' - \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \langle \mathbf{S}' \rangle + C.$$

Здесь константа $C = (\mathbf{S} - \langle \mathbf{S} \rangle) \cdot (\mathbf{S}' - \langle \mathbf{S}' \rangle)$ описывает спиновые корреляции. Обычное приближение молекулярного поля состоит в том, что третье слагаемое в данном тождестве $\langle \mathbf{S} \rangle \cdot \langle \mathbf{S}' \rangle$ отбрасывается, а для константы C используется приближение $C \sim \langle C \rangle = \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}' \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \langle \mathbf{S}' \rangle$. Рассмотрим этот вопрос подробнее. Полезно проследить эволюцию концепции среднего или молекулярного поля для разных систем. Сводка некоторых работ, в которых развивалась концепция среднего поля, дана в таблице.

При взгляде на эту таблицу можно заметить определенную тенденцию. Ранние концепции молекулярного поля описывали среднее поле в терминах некоторого функционала средней плотности частиц $\langle n \rangle$ (или в магнитной терминологии — среднего магнитного момента $\langle M \rangle$), т. е. как $F[\langle n \rangle, \langle M \rangle]$. На более современном языке это означает, что *взаимодействие* между атомными спинами S_i и их соседями можно эквивалентным образом описать в виде *эффективного* (или среднего) поля $h^{(\text{mf})}$, в результате чего можно записать

$$M_i = \chi_0 [h_i^{(\text{ext})} + h_i^{(\text{mf})}].$$

Среднее поле $h^{(\text{mf})}$ представляется в виде (для случая $T > T_c$)

$$h^{(\text{mf})} = \sum_i J(R_{ji}) \langle S_i \rangle. \quad (91)$$

Здесь h^{ext} — внешнее магнитное поле; χ_0 — функция отклика системы и $J(R_{ji})$ — взаимодействие между спинами. Другими словами, в приближении среднего поля многочастичная задача сводится к ситуации, когда магнитный момент в любом узле выстраивается либо параллельно, либо антипараллельно полному магнитному полю, которое складывается из приложенного внешнего

Развитие концепции среднего поля

Тип среднего поля	Автор	Год
Однородное молекулярное поле в плотных газах	И. Д. Ван дер Ваальс	1873
Однородное квазимагнитное среднее поле в магнетиках	П. Вейсс	1907
Среднее поле в атомах: модель Томаса–Ферми	Л. Томас, Э. Ферми	1926–1928
Молекулярное поле в ферромагнетиках	Я. Г. Дорфман, Ф. Блох	1927–1930
Однородное среднее поле в многоэлектронных атомах	Д. Хартри, В. А. Фок	1928–1932
Неоднородные (локальные) средние поля в антиферромагнетиках	Л. Неель	1932
Молекулярное поле с учетом реакции полости в полярных веществах	Л. Онсагер	1936
Модель Стонера зонных магнетиков	Э. Стонер	1938
Обобщенное приближение среднего поля в многочастичных системах	Т. Киношита, Й. Намбу	1954
Среднее поле БКШ–Боголюбова в сверхпроводниках	Н. Н. Боголюбов	1958
Расщепление Тябликова для ферромагнетика	С. В. Тябликов	1959
Теория среднего поля для модели Андерсона	Ф. В. Андерсон	1961
Расщепление Каллена для ферромагнетика	Г. Каллен	1963
Теория функционала плотности для электронного газа	В. Кон	1964
Аналогия сплава (среднее поле) для модели Хаббарда	Дж. Хаббард	1964
Обобщенное приближение Хартри–Фока для ферро- и антиферромагнетика	Ю. А. Церковников, Ю. Г. Рудой	1973–1975
Обобщенное приближение среднего поля для ферромагнетика	Н. М. Плакида	1973
Обобщенное приближение среднего поля для модели Хаббарда	А. Л. Куземский	1973–2002
Обобщенное приближение среднего поля для антиферромагнетика	А. Л. Куземский, Д. Марваков	1990
Обобщенное приближение хаотических фаз в теории ферромагнетизма	А. Чахор, А. Холас	1990
Обобщенное приближение среднего поля для зонного антиферромагнетика	А. Л. Куземский	1999
Среднее поле Хартри–Фока–Боголюбова в ферми-системах	Н. Н. Боголюбов (мл.)	2000

поля и молекулярного поля. При этом в расчет принимается «усредненное» взаимодействие i соседних узлов, а флуктуационные эффекты не учитываются. Видно, что приближение среднего поля сильно огрубляет реальную ситуацию и преувеличивает взаимодействие между частицами. Попытки улучшить приближение однородного среднего поля предпринимались по разным направлениям [269]. Чрезвычайно удачный и весьма нетривиальный подход разработал Л. Неель [54], который, по существу, сформулировал концепцию локальных средних полей (1932 г.). Неель предположил, что знак среднего поля может быть как положительный, так и отрицательный. При этом он показал, что ниже некоторой критической температуры (температуры Нееля) наиболее энергетически выгодным является такое расположение атомных магнитных моментов, при котором имеется равное количество атомных магнитных моментов, направленных противоположно друг другу. Эта новая магнитная структура получила название *антиферромагнетизм* [270]. Было установлено, что антиферромагнитное взаимодействие стремится выстроить соседние спины в противоположном направлении; в одномерном случае это соответствует структуре с чередованием спинов «вверх» и «вниз». В дальнейшем было высказано предположение, что состояние с двумя вставленными друг в друга подрешетками является основным состоянием системы (в классическом смысле). При этом знак среднего поля чередуется в «шахматном» (staggered) порядке.

Вопрос об истинном основном состоянии антиферромагнетика не вполне прояснен вплоть до настоящего времени [271–275]. Связано это с тем, что в отличие от ферромагнетика, у которого имеется единственное основное состояние, у антиферромагнетика может быть несколько различных оптимальных состояний с наименьшей энергией. Неелевское основное состояние понимается в том смысле, что *возможно* записать волновую функцию системы, описывающую антиферромагнитное упорядочение всех спинов [275]. В строгом смысле основное состояние есть равновесное термодинамическое состояние системы при температуре, равной нулю. Является ли неелевское состояние основным состоянием именно в этом смысле, неизвестно. Ясно, что неелевское состояние в общем случае не является собственным состоянием гамильтониана гейзенберговского антиферромагнетика. Напротив, оно является некоторой комбинацией собственных состояний системы, как и любое другое возможное квантовое состояние системы. Поэтому основной проблемой, требующей строгого доказательства, является вопрос об устойчивости неелевского состояния [276]. В определенном смысле только для бесконечно большой системы неелевское состояние становится собственным состоянием и основным состоянием системы. Тем не менее подрешеточная структура наблюдается в экспериментах по рассеянию нейтронов [76], и реальное существование подрешеток [108], несмотря на определенные возражения [35], сомнений не вызывает.

После работ Нееля концепция эффективного среднего поля начала развиваться более быстрыми темпами. В 1936 г. существенное обобщение и развитие концепции среднего поля было предложено Л. Онсагером [277] в контексте теории полярных жидкостей. Этот подход стал называться *приближением онсагеровского поля реакции*. Он получил широкое распространение, в том числе в физике магнитных явлений [278–281]. В 1954 г. Намбу [282] развил систематический метод описания многочастичной системы в терминах подхода, отвечающего концепции *обобщенного* среднего поля. В дальнейшем были предложены разнообразные схемы «эффективного среднего поля с учетом корреляций» (см. обзор [20]). В рамках вариационного принципа [16, 283, 284] можно показать, что различные приближения среднего поля можно описать исходя из неравенства Боголюбова [4]:

$$F = -\beta^{-1} \ln (\operatorname{Tr} e^{-\beta H}) \leq -\beta^{-1} \ln (\operatorname{Tr} e^{-\beta H^{\text{mf}}}) + \frac{\operatorname{Tr} e^{-\beta H^{\text{mf}}} (H - H^{\text{mf}})}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H^{\text{mf}}}}. \quad (92)$$

Здесь F — свободная энергия рассматриваемой системы, вычислить которую в общем случае весьма сложно. Величина H^{mf} есть некий *пробный* гамильтониан в приближении эффективного поля. Данное неравенство определяет верхнюю границу свободной энергии многочастичной системы. Следует отметить, что теория сверхпроводимости БКШ–Боголюбова [227–230] формулируется на основе пробного (аппроксимирующего) гамильтониана, который является квадратичной формой операторов вторичного квантования рождения и уничтожения, включая *аномальные* (или недиагональные) средние. Для однозонной модели Хаббарда функционал обобщенных средних полей БКШ–Боголюбова запишется в виде [20]

$$\Sigma_{i\sigma}^c = U \begin{pmatrix} \langle a_{i-\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} \rangle & -\langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} \rangle \\ -\langle a_{i-\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \rangle & -\langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \rangle \end{pmatrix}. \quad (93)$$

Аномальные (или недиагональные) средние значения в этом выражении фиксируют вакуумное состояние системы именно в виде БКШ–Боголюбова. Подробный анализ подхода Н. Н. Боголюбова к исследованию приближения типа среднего поля (Хартри–Фока–Боголюбова) для моделей с четырехфермионным взаимодействием дан в работах [6, 285].

Существует много различных подходов к построению обобщенных приближений среднего поля, но все они имеют частный характер. Метод неприводимых функций Грина позволяет подойти к данной проблеме более систематическим образом. Для того чтобы пояснить это положение, рассмотрим в качестве примера два подхода к линеаризации уравнений движения для ФГ, а именно приближение Тябликова [16] и приближение Каллена [286] для изотропной модели Гейзенберга (12). Рассмотрим уравнение движения (52) для

ФГ вида $\langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle$:

$$\omega \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega = 2 \langle S^z \rangle \delta_{ij} + \sum_g J(i-g) \langle\langle S_i^+ S_g^z - S_g^+ S_i^z | S_j^- \rangle\rangle_\omega.$$

В приближении Тябликова ФГ второго порядка выражается через исходную ФГ следующим приближенным образом [16]:

$$\langle\langle S_i^+ S_g^z | S_j^- \rangle\rangle \simeq \langle S^z \rangle \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle. \quad (94)$$

Известно, что приближение Тябликова (94) соответствует приближению хаотических фаз для электронного газа. Спектр спин-волновых возмущений в этом приближении не содержит затухания:

$$E(q) = \sum_g J(i-g) \langle S^z \rangle \exp [i(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_g)\mathbf{q}] = 2 \langle S^z \rangle (J_0 - J_q). \quad (95)$$

Это обстоятельство обусловлено тем, что приближение Тябликова не учитывает *процессов неупругого рассеяния* квазичастиц. Можно также сказать, что в приближении Тябликова точные коммутационные соотношения $[S_i^+, S_j^-]_- = 2S_i^z \delta_{ij}$ аппроксимируются приближенными соотношениями вида $[S_i^+, S_j^-]_- \simeq 2 \langle S^z \rangle \delta_{ij}$. Несмотря на простоту, приближение Тябликова широко используется в различных задачах вплоть до настоящего времени [287].

Каллен предложил модифицированный вариант приближения Тябликова, частично учитывающий корреляционные эффекты. В приближении Каллена [286] используется следующий способ линеаризации уравнений движения:

$$\langle\langle S_g^z S_f^+ | B \rangle\rangle \rightarrow \langle S^z \rangle \langle\langle S_f^+ | B \rangle\rangle - \alpha \langle S_g^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_g^+ | B \rangle\rangle. \quad (96)$$

Здесь $0 \leq \alpha \leq 1$. Чтобы лучше понять идею расщепления Каллена, необходимо принять во внимание, что для спина $1/2$ спиновый оператор S^z можно представить в виде $S_g^z = S - S_g^- S_g^+$ или $S_g^z = (1/2)(S_g^+ S_g^- - S_g^- S_g^+)$. Таким образом, имеем

$$S_g^z = \alpha S + \frac{1-\alpha}{2} S_g^+ S_g^- - \frac{1+\alpha}{2} S_g^- S_g^+.$$

Оператор $S_g^- S_g^+$ есть «отклонение» величины $\langle S^z \rangle$ от S . В области низких температур это «отклонение» мало и $\alpha \sim 1$. Аналогичным образом оператор $(1/2)(S_g^+ S_g^- - S_g^- S_g^+)$ представляет собой «отклонение» величины $\langle S^z \rangle$ от нуля. Поэтому, когда $\langle S^z \rangle$ приближается к нулю, можно ожидать, что $\alpha \sim 0$. Таким образом, приближение Каллена имеет *интерполяционный* характер; с его помощью можно получать как положительные, так и отрицательные

поправки к приближению Тябликова или почти нулевые поправки, в зависимости от выбора величины α . Приближению Тябликова соответствует значение $\alpha = 0$. Подчеркнем, что подход Каллена не является сколько-нибудь строгим. Более того, он также имеет серьезные недостатки [20]. Однако это приближение можно считать первой серьезной попыткой построить интерполяционную схему приближения в рамках метода уравнений движения для ФГ. В отличие от приближения Тябликова, в приближении Каллена спектр спин-волновых возбуждений имеет вид

$$E(q) = 2\langle S^z \rangle \left((J_0 - J_q) + \frac{\langle S^z \rangle}{NS^2} \sum_k [J(k) - J(k - q)]N(E(k)) \right). \quad (97)$$

Здесь $N(E(k))$ есть бозевская функция распределения $N(E(k)) = [\exp(E(k)\beta) - 1]^{-1}$. Из (97) ясно видно, как именно приближение Каллена улучшает приближение Тябликова. С общей точки зрения нужно найти, каков вид функционала эффективного самосогласованного *обобщенного среднего поля*, т. е. найти, от каких средних это поле зависит:

$$F = \{\langle S^z \rangle, \langle S^x \rangle, \langle S^y \rangle, \langle S^+ S^- \rangle, \langle S^z S^z \rangle, \langle S^z S^+ S^- \rangle, \dots\}.$$

В дальнейшем было предложено большое количество приближенных схем расщепления цепочки уравнений для ФГ [16], улучшающих расщепления Тябликова и Каллена. Подробное рассмотрение различных подходов к обобщению приближения хаотических фаз в теории ферромагнетизма в широком интервале температур было проведено в работе Чахора и Холаса [288].

5.4. Антиферромагнетик Гейзенберга и аномальные средние. Для того чтобы проиллюстрировать схему метода неприводимых ФГ, рассмотрим теперь антиферромагнетик Гейзенберга. Заметим, что последовательная микроскопическая теория антиферромагнетизма все еще не построена. В рамках модели локализованных спинов появление антиферромагнитной фазы обычно связывают с первой расходимостью обобщенной спиновой восприимчивости, если обменный интеграл между ближайшими соседями отрицателен. Первая расходимость возникает при $\mathbf{Q} = \pi/a(\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c})$. Это означает, что фаза вектора намагниченности меняется на величину π при переходе от одной плоскости атомов к другой при движении вдоль вектора \mathbf{Q} . Вообще говоря, в кристаллах сложной структуры обменное взаимодействие может быть различным для различных соседей. Поэтому имеется большое разнообразие антиферромагнитных конфигураций. Наиболее простой и употребительной моделью антиферромагнетизма с локализованными спинами является гейзенберговская модель двухподрешеточного антиферромагнетика. Рассмотрим вычисление перенормированного квазичастичного спектра магнитных возбуждений гейзенберговского двухподрешеточного антиферромагнетика с помощью

метода неприводимых ФГ [289]. Гамильтониан системы имеет вид

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\alpha'} J^{\alpha\alpha'}(i-j) \mathbf{S}_{i\alpha} \mathbf{S}_{j\alpha'} = -\frac{1}{2} \sum_q \sum_{\alpha\alpha'} J_q^{\alpha\alpha'} \mathbf{S}_{q\alpha} \mathbf{S}_{-q\alpha'}. \quad (98)$$

Здесь $S_{i\alpha}$ есть оператор спина в узле i подрешетки α ; $J^{\alpha\alpha'}(i-j)$ — интеграл обмена между спинами атомов в узлах $R_{i\alpha}$ и $R_{j\alpha'}$; α, α' принимают два значения (a, b) . Предполагается, что все атомы подрешетки α идентичны и имеют спин S_α . Удобно переписать гамильтониан (98) в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_q \sum_{\alpha\alpha'} I_q^{\alpha\alpha'} (S_{q\alpha}^+ S_{-q\alpha'}^- + S_{q\alpha}^z S_{-q\alpha'}^z), \quad (99)$$

где

$$I_q^{\alpha\alpha'} = 1/2(J_q^{\alpha\alpha'} + J_{-q}^{\alpha'\alpha}).$$

Снова рассмотрим уравнение движения (52) для ФГ вида $\langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle$. Однако, в отличие от модели ферромагнетика Гейзенберга, для двухподрешеточного антиферромагнетика нам необходимо использовать *матричную* ФГ следующего вида:

$$\hat{G}(k; \omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle S_{ka}^+ | S_{-ka}^- \rangle\rangle & \langle\langle S_{ka}^+ | S_{-kb}^- \rangle\rangle \\ \langle\langle S_{kb}^+ | S_{-ka}^- \rangle\rangle & \langle\langle S_{kb}^+ | S_{-kb}^- \rangle\rangle \end{pmatrix}. \quad (100)$$

Здесь ФГ, стоящие на главной диагонали, — это обычные, или *нормальные*, ФГ, в то время как недиагональные ФГ описывают вклады так называемых *аномальных* членов, аналогичных аномальным членам в теории сверхпроводимости БКШ–Боголюбова (93). Аномальные (или недиагональные) средние значения в этом случае фиксируют вакуумное состояние системы именно в виде неелевского двухподрешеточного состояния. Вывод уравнения Дайсона (87) производится с помощью введения неприводимых операторов вида

$$(S_{kq}^{ab})^{(ir)} = S_{kq}^{ab} - A_q^{ab} S_{ka}^+ + A_{k-q}^{ba} S_{kb}^+, \quad (101)$$

$$(S_{q\alpha}^z)^{(ir)} = S_{q\alpha}^z - N^{1/2} \langle S_\alpha^z \rangle \delta_{q,0}, \quad (102)$$

где $S_{kq}^{ab} = (S_{k-q,a}^+ S_{qb}^z - S_{qb}^+ S_{k-q,a}^z)$. После проведения стандартных преобразований можно получить уравнение Дайсона в матричном виде:

$$\hat{G}(k, \omega) = \hat{G}_0(k, \omega) + \hat{G}_0(k, \omega) \hat{M}(k, \omega) \hat{G}(k, \omega). \quad (103)$$

Здесь $\hat{G}_0(k, \omega)$ — ФГ в приближении обобщенного среднего поля

$$\hat{G}_0 = \begin{pmatrix} G_0^{aa}(k, \omega) & G_0^{ab}(k, \omega) \\ G_0^{ba}(k, \omega) & G_0^{bb}(k, \omega) \end{pmatrix} = \frac{2\langle S_a^z \rangle}{\det \hat{\Omega}} \begin{pmatrix} (\omega - \omega_{aa}) & \omega_{ab} \\ \omega_{ab} & (\omega - \omega_{bb}) \end{pmatrix}, \quad (104)$$

где

$$\det \hat{\Omega} = (\omega - \omega_{aa})(\omega - \omega_{bb}) - \omega_{aa}\omega_{ab}.$$

Полюса ФГ (104) определяют спектр магнитных возбуждений в приближении обобщенного среднего поля (поправки упругого рассеяния):

$$\det \hat{\Omega} = 0.$$

В результате получим

$$\omega_{\pm}(k) = \pm \sqrt{(\omega_{aa}^2(k) - \omega_{ab}^2(k))}, \quad (105)$$

$$\omega(k) = Iz \langle S_a^z \rangle \left[1 - \frac{1}{N^{1/2} \langle S_a^z \rangle} \sum_q \gamma_q A_q^{ab} \right] \sqrt{(1 - \gamma_k^2)}, \quad (106)$$

где $I_q = zI\gamma_q$, $\gamma_k = (1/z) \sum_i \exp(ikR_i)$ и z — число ближайших соседей.

Первое слагаемое в (106) соответствует приближению Тябликова; второе слагаемое описывает поправки упругого рассеяния в приближении обобщенного среднего поля. Заметим, что величина A_q^{ab} , определяющая эти поправки, имеет вид

$$A_q^{ab} = \frac{2 \langle (S_{-qa}^z)^{(ir)} \rangle \langle (S_{qb}^z)^{(ir)} \rangle + \langle S_{-qa}^- S_{qb}^+ \rangle}{2N^{1/2} \langle S_a^z \rangle}. \quad (107)$$

Это выражение содержит *аномальные средние* $\langle S_{-qa}^- S_{qb}^+ \rangle$, характеризующие неелевское основное состояние.

5.5. Многочастичные системы с сильной и слабой электронной корреляцией. В работах [20, 22–24, 253] была показана эффективность метода неприводимых функций Грина для описания нормальных и сверхпроводящих свойств систем с сильным взаимодействием и сложным характером электронного спектра. Рассмотрим модель Хаббарда (18). Свойства этого гамильтониана определяются взаимным соотношением двух параметров: эффективной ширины зоны Δ и энергии отталкивания электронов U . С изменением их отношения в системе происходят радикальные изменения типа перехода металл–диэлектрик и т.п. Заметим, что при этом также должен меняться характер описания системы, т.е. мы должны описывать нашу систему подходящим (relevant) набором переменных.

В случае слабой корреляции [20, 22–24, 253] соответствующим подходящим набором переменных будут обычные ферми-операторы вторичного квантования $a_{i\sigma}^\dagger$ и $a_{i\sigma}$, а также оператор числа частиц $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$. Эти операторы обладают следующими свойствами:

$$a_i^\dagger \Psi^{(0)} = \Psi_i^{(1)}; \quad a_i \Psi^{(1)} = \Psi^{(0)}, \quad a_i \Psi^{(0)} = 0, \quad a_j \Psi_i^{(1)} = 0 \quad (i \neq j).$$

Здесь $\Psi^{(0)}$ и $\Psi^{(1)}$ описывают вакуумное и одночастичное состояния соответственно [159]. Для того чтобы найти низколежащие возбужденные квазичастичные состояния многоэлектронной системы с гамильтонианом (18), необходимо совершить преобразование к векторному пространству блоховских состояний

$$a_{\mathbf{k}\sigma} = N^{-1/2} \sum_i \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i) a_{i\sigma}.$$

В этом представлении гамильтониан (18) запишется в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon(k) a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{pqrs} a_{p+r-q\sigma}^\dagger a_{p\sigma} a_{q-\sigma}^\dagger a_{r-\sigma}. \quad (108)$$

Рассмотрим теперь одночастичную ФГ электронов в виде

$$G_{k\sigma}(t-t') = \langle \langle a_{k\sigma}, a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle = -i\theta(t-t') \langle [a_{k\sigma}(t), a_{k\sigma}^\dagger(t')]_+ \rangle. \quad (109)$$

Соответствующее уравнение движения (52) для $G_{k\sigma}(\omega)$ запишется в виде

$$(\omega - \epsilon_k) G_{k\sigma}(\omega) = 1 + \frac{U}{N} \sum_{pq} \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \quad (110)$$

В соответствии с уравнением (80) введем *неприводимую* ФГ

$${}^{(\text{ir})} \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega - \delta_{p,0} \langle n_{q-\sigma} \rangle G_{k\sigma}. \quad (111)$$

Неприводимая (ir) ФГ в уравнении (111) определена таким образом, чтобы ее нельзя было свести к ФГ низшего порядка произвольным спариванием фермионных операторов вторичного квантования. Далее, в соответствии с уравнениями (80)–(88) найдем

$$G_{k\sigma}(\omega) = G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) + G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) \frac{U}{N} \sum_{pq} {}^{(\text{ir})} \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \quad (112)$$

Здесь было введено обозначение

$$G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) = (\omega - \epsilon(k\sigma))^{-1}; \quad \epsilon(k\sigma) = \epsilon(k) + \frac{U}{N} \sum_q \langle n_{q-\sigma} \rangle. \quad (113)$$

В дальнейшем для простоты рассмотрим только парамагнитные решения, когда $\langle n_\sigma \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle$. В соответствии с уравнениями (80)–(88) получим

$$G_{k\sigma}(\omega) = G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) + G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) P_{k\sigma}(\omega) G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega). \quad (114)$$

Оператор P имеет вид

$$\begin{aligned} P_{k\sigma}(\omega) &= \frac{U^2}{N^2} \sum_{pqrs} D_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r, s; \omega) = \\ &= \frac{U^2}{N^2} \sum_{pqrs} \left({}^{(\text{ir})} \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{r-\sigma}^\dagger a_{r+s-\sigma} a_{k+s\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{\omega} \right)^{(\text{ir})}. \end{aligned} \quad (115)$$

Собственная часть оператора P записывается в виде

$$\begin{aligned} D_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r, s; \omega) &= L_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r, s; \omega) + \\ &+ \frac{U^2}{N^2} \sum_{r's'p'q'} L_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r's'; \omega) G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) D_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p', q'|r, s; \omega). \end{aligned} \quad (116)$$

Здесь $L_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r, s; \omega)$ есть *собственная* часть ФГ $D_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r, s; \omega)$. В результате найдем

$$G_{k\sigma} = G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) + G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) M_{k\sigma}(\omega) G_{k\sigma}(\omega). \quad (117)$$

Уравнение (117) и есть искомое уравнение Дайсона для двухвременной температурной ФГ $G_{k\sigma}(\omega)$. Оно имеет следующее формальное решение (88):

$$G_{k\sigma}(\omega) = [\omega - \epsilon(k\sigma) - M_{k\sigma}(\omega)]^{-1}. \quad (118)$$

Массовый оператор M имеет вид

$$\begin{aligned} M_{k\sigma}(\omega) &= \frac{U^2}{N^2} \sum_{pqrs} L_{k\sigma}^{(\text{ir})}(p, q|r, s; \omega) = \\ &= \frac{U^2}{N^2} \sum_{pqrs} \left({}^{(\text{ir})} \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{r-\sigma}^\dagger a_{r+s-\sigma} a_{k+s\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{\omega} \right)^{(\text{ir})} \quad (119) \end{aligned}$$

В работах [20, 22–24, 253] было показано, что массовый оператор M можно вычислить в следующем приближенном виде:

$$\begin{aligned} M_{k\sigma}(\omega) &\simeq \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \int \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3} \times \\ &\times \left[n(\omega_2)n(\omega_3) + n(\omega_1) \left(1 - n(\omega_2) - n(\omega_3) \right) \right] g_{p+q-\sigma}(\omega_1) g_{k+p\sigma}(\omega_2) g_{q-\sigma}(\omega_3). \end{aligned} \quad (120)$$

Здесь

$$n(\omega) = [\exp(\beta\omega) + 1]^{-1}; \quad g_{k\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\varepsilon).$$

Уравнения (118) и (120) составляют *самосогласованную* систему уравнений для определения одночастичной ФГ $G_{k\sigma}(\omega)$. В качестве первой итерации можно подставить в правую часть уравнения (120) выражение

$$g_{k\sigma}(\omega) \approx \delta(\omega - \epsilon(k\sigma)). \quad (121)$$

Тогда получим

$$M_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \frac{n_{p+q-\sigma}(1 - n_{k+p\sigma} - n_{q-\sigma}) + n_{k+p\sigma}n_{q-\sigma}}{\omega + \epsilon(p+q\sigma) - \epsilon(k+p\sigma) - \epsilon(q\sigma)}. \quad (122)$$

Формула (122) описывает перенормировку электронного спектра за счет процессов *неупругого* рассеяния электронов; все поправки *упругого* рассеяния были отнесены ранее к перенормированной энергии электронов (113). Таким образом, исследование модели Хаббарда в пределе слабой связи можно провести относительно просто.

Наибольшую трудность для решения модели Хаббарда представляет случай очень сильной, но конечной корреляции электронов. В этом пределе удобно рассматривать одночастичную ФГ в представлении Ванье

$$G_{ij\sigma}(t-t') = \langle\langle a_{i\sigma}(t); a_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle. \quad (123)$$

В случае сильной корреляции алгебра релевантных операторов должна быть выбрана в соответствии с условиями задачи. Удобно использовать операторы Хаббарда [166]:

$$\begin{aligned} d_{i\alpha\sigma} &= n_{i-\sigma}^\alpha a_{i\sigma}, \quad (\alpha = \pm); \quad n_{i\sigma}^+ = n_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma}^- = (1 - n_{i\sigma}); \\ \sum n_{i\sigma}^\alpha &= 1; \quad n_{i\sigma}^\alpha n_{i\sigma}^\beta = \delta_{\alpha\beta} n_{i\sigma}^\alpha; \quad \sum_\alpha d_{i\alpha\sigma} = a_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (124)$$

Новые операторы $d_{i\alpha\sigma}$ и $d_{j\beta\sigma}^\dagger$ имеют сложные коммутационные соотношения, а именно

$$[d_{i\alpha\sigma}, d_{j\beta\sigma}^\dagger]_+ = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} n_{i-\sigma}^\alpha.$$

Удобство использования этих операторов становится понятным, если мы рассмотрим уравнения движения для них:

$$\begin{aligned} [d_{i\alpha\sigma}, H]_- &= E_\alpha d_{i\alpha\sigma} + \sum_{ij} t_{ij} (n_{i-\sigma}^\alpha a_{j\sigma} + \alpha a_{i\sigma} b_{ij-\sigma}), \\ b_{ij\sigma} &= (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} - a_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma}). \end{aligned} \quad (125)$$

Согласно Хаббарду [166], вклады в это уравнение описывают поправки *аналогии сплава* (alloy analogy) и поправки *резонансного уширения* (resonance

broadening corrections). С помощью операторов Хаббарда можно записать ФГ (123) в виде

$$G_{ij\sigma}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \langle\langle d_{i\alpha\sigma} | d_{j\beta\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega = \sum_{\alpha\beta} F_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(\omega). \quad (126)$$

Уравнение движения для вспомогательной ФГ F

$$F_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(\omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle d_{i+\sigma} | d_{j+\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle d_{i+\sigma} | d_{j-\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle d_{i-\sigma} | d_{j+\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle d_{i-\sigma} | d_{j-\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega \end{pmatrix} \quad (127)$$

примет следующую форму:

$$(\mathbf{E}F_{ij\sigma}(\omega) - \mathbf{I}\delta_{ij})_{\alpha\beta} = \sum_{l \neq i} t_{il} \langle\langle n_{i-\sigma}^\alpha a_{l\sigma} + \alpha a_{i\sigma} b_{il-\sigma} | d_{j\beta\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega. \quad (128)$$

Здесь были использованы следующие обозначения:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} (\omega - E_+) & 0 \\ 0 & (\omega - E_-) \end{pmatrix}; \quad \mathbf{I} = \begin{pmatrix} n_{-\sigma}^+ & 0 \\ 0 & n_{-\sigma}^- \end{pmatrix}. \quad (129)$$

Определение неприводимых частей ФГ имеет более сложный характер:

$$\mathbf{D}_{il,j}^{(ir)}(\omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle Z_{11} | d_{j+\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle Z_{12} | d_{j-\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle Z_{21} | d_{j+\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle Z_{22} | d_{j-\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega \end{pmatrix} - \sum_{\alpha'} \begin{pmatrix} [A_{il}^{+\alpha'}] \\ [A_{il}^{-\alpha'}] \end{pmatrix} [F_{ij\sigma}^{\alpha'+} \ F_{ij\sigma}^{\alpha'-}] - \begin{pmatrix} [B_{li}^{+\alpha'}] \\ [B_{li}^{-\alpha'}] \end{pmatrix} [F_{lj\sigma}^{\alpha'+} \ F_{lj\sigma}^{\alpha'-}]. \quad (130)$$

Для сокращения записи использовались обозначения:

$$Z_{11} = Z_{12} = n_{i-\sigma}^+ a_{l\sigma} + a_{i\sigma} b_{il-\sigma}; \quad Z_{21} = Z_{22} = n_{i-\sigma}^- a_{l\sigma} - a_{i\sigma} b_{il-\sigma}.$$

Следует подчеркнуть, что определение (130) играет центральную роль в данном методе. Коэффициенты A и B определяются из условия ортогональности (81)

$$\langle\langle (\mathbf{D}_{il,j}^{(ir)})_{\alpha\beta}, d_{j\beta\sigma}^\dagger \rangle\rangle_+ = 0. \quad (131)$$

Далее, согласно (79)–(88) выводится точное уравнение Дайсона, массовый оператор которого имеет вид

$$\mathbf{M}_{q\sigma}(\omega) = (\mathbf{P}_{q\sigma}(\omega))^p = \left(\mathbf{I}^{-1} \left[\sum_{lm} t_{il} t_{mj} \langle\langle \mathbf{D}_{il,j}^{(ir)} | \mathbf{D}_{i,mj}^{(ir)\dagger} \rangle\rangle_\omega \right]_q \mathbf{I}^{-1} \right)^p. \quad (132)$$

ФГ в обобщенном приближении среднего поля имеет очень сложную функциональную структуру [20, 22–24, 253]:

$$G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) = \frac{\omega - (n_{-\sigma}^+ E_- + n_{-\sigma}^- E_+) - \lambda(k)}{(\omega - E_+ - n_{-\sigma}^- \lambda_1(k))(\omega - E_- - n_{-\sigma}^+ \lambda_2(k)) - n_{-\sigma}^- n_{-\sigma}^+ \lambda_3(k) \lambda_4(k)}. \quad (133)$$

Здесь величины $\lambda_i(k)$ представляют собой компоненты обобщенного среднего поля, которое не сводится к функционалу средних плотностей частиц. Выражение для ФГ (133) можно записать в виде обобщенного *двухполюсного* решения в виде

$$G_{k\sigma}^{\text{MF}}(\omega) = \frac{n_{-\sigma}^+(1 + cb^{-1})}{a - db^{-1}c} + \frac{n_{-\sigma}^-(1 + da^{-1})}{b - ca^{-1}d} \approx \approx \frac{n_{-\sigma}^-}{\omega - E_- - n_{-\sigma}^+ W_{k-\sigma}^-} + \frac{n_{-\sigma}^+}{\omega - E_+ - n_{-\sigma}^- W_{k-\sigma}^+}, \quad (134)$$

где

$$\begin{aligned} n_{-\sigma}^+ n_{-\sigma}^- W_{k-\sigma}^\pm = \\ = N^{-1} \sum_{ij} t_{ij} \exp[-ik(R_i - R_j)] \left(\langle (a_{i-\sigma}^\dagger n_{i\sigma}^\pm a_{j-\sigma}) + \langle a_{i-\sigma} n_{i\sigma}^\mp a_{j-\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \right. \\ \left. + \langle (n_{j-\sigma}^\pm n_{i-\sigma}^\pm) + \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^\dagger a_{j-\sigma} a_{j\sigma}^\dagger \rangle - \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} a_{j-\sigma}^\dagger a_{j\sigma}^\dagger \rangle \right). \quad (135) \end{aligned}$$

ФГ (134) дает наиболее общее решение модели Хаббарда в обобщенном приближении среднего поля; выражение (135) есть не что иное, как явное выражение для обобщенного среднего поля. Как видно, это среднее поле не сводится к функционалу средних плотностей частиц. Решение (134) более общее, чем решение «Хаббард III» [166] и двухполюсное решение Рот [290, 291]. Нами было показано [20, 22–24, 253], что решение «Хаббард I» [164] есть частный случай решения (134), отвечающее *дополнительному* приближению

$$n_{-\sigma}^+ n_{-\sigma}^- W_{k-\sigma}^\pm(k) \approx N^{-1} \sum_{ij} t_{ij} \exp[-ik(R_i - R_j)] \langle n_{j-\sigma}^\pm n_{i-\sigma}^\pm \rangle. \quad (136)$$

Полагая $\langle n_{j-\sigma} n_{i-\sigma} \rangle \approx n_{-\sigma}^2$, приходим к приближению «Хаббард I» [164]. Таким образом, нами было доказано, что для систем с сильным взаимодействием и сложным характером квазичастичного спектра обобщенные средние поля могут иметь весьма нетривиальную структуру, которую трудно установить из каких-либо независимых соображений. Метод неприводимых ФГ позволяет получить эту структуру в наиболее общем виде.

5.6. Уравнения сверхпроводимости. Нетривиальная структура обобщенных средних полей в многочастичных системах наглядно проявляется при описании сверхпроводимости. Рассмотрим кратко этот вопрос, следуя работам [20, 23, 183, 292]. Будем описывать нашу систему гамильтонианом

$$H = H_e + H_i + H_{e-i}. \quad (137)$$

Здесь оператор H_e есть гамильтониан электронной подсистемы кристалла, которую мы описываем гамильтонианом Хаббарда (18). Гамильтониан ионной подсистемы и оператор взаимодействия электронов с решеткой запишем в виде

$$H_i = \frac{1}{2} \sum_n \frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{mn\alpha\beta} \Phi_{nm}^{\alpha\beta} u_n^\alpha u_m^\beta, \quad (138)$$

$$H_{e-i} = \sum_\sigma \sum_{n,i \neq j} V_{ij}^\alpha(\mathbf{R}_n^0) a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} u_n^\alpha, \quad (139)$$

где

$$\sum_n V_{ij}^\alpha(\mathbf{R}_n^0) u_n^\alpha = \frac{\partial t_{ij}(\mathbf{R}_{ij}^0)}{\partial R_{ij}^0} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j). \quad (140)$$

Здесь P_n — оператор импульса; M — масса иона и u_n — смещение иона из положения равновесия в узле решетки R_n . В более удобных обозначениях оператор взаимодействия электронов с решеткой запишем в виде

$$H_{e-i} = \sum_{\nu\sigma} \sum_{kq} V^\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) Q_{q\nu} a_{k+q\sigma}^\dagger a_{k\sigma}, \quad (141)$$

где

$$V^\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{2iq_0}{(NM)^{1/2}} \sum_\alpha t(\mathbf{a}_\alpha) e_\nu^\alpha(\mathbf{q}) [\sin \mathbf{a}_\alpha \mathbf{k} - \sin \mathbf{a}_\alpha (\mathbf{k} - \mathbf{q})]. \quad (142)$$

Здесь q_0 — коэффициент Слэтера [20, 183, 292], описывающий экспоненциальное убывание волновой функции d -электронов. Величины $e_\nu(\mathbf{q})$ есть векторы поляризации фононных мод. Гамильтониан ионной подсистемы перепишется в виде

$$H_i = \frac{1}{2} \sum_{q\nu} (P_{q\nu}^\dagger P_{q\nu} + \omega^2(q\nu) Q_{q\nu}^\dagger Q_{q\nu}). \quad (143)$$

Здесь $P_{q\nu}$ и $Q_{q\nu}$ — нормальные координаты; $\omega(q\nu)$ — акустические фононные частоты. Рассмотрим теперь обобщенную одноэлектронную ФГ вида:

$$G_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle a_{i\sigma} | a_{j-\sigma} \rangle\rangle \\ \langle\langle a_{i-\sigma}^\dagger | a_{j\sigma} \rangle\rangle & \langle\langle a_{i-\sigma}^\dagger | a_{j-\sigma} \rangle\rangle \end{pmatrix}.$$

Как уже обсуждалось выше, недиагональные члены этой матрицы фиксируют вакуумное состояние системы в виде БКШ–Боголюбова и отвечают за наличие *аномальных средних*. Соответствующие уравнения движения будут иметь вид

$$\sum_j (\omega \delta_{ij} - t_{ij}) \langle \langle a_{j\sigma} | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \delta_{ii'} + U \langle \langle a_{i\sigma} n_{i-\sigma} | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \sum_{nj} V_{ijn} \langle \langle a_{j\sigma} u_n | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \quad (144)$$

$$\begin{aligned} \sum_j (\omega \delta_{ij} + t_{ij}) \langle \langle a_{j-\sigma}^\dagger | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \\ &= -U \langle \langle a_{i-\sigma}^\dagger n_{i\sigma} | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \sum_{nj} V_{jin} \langle \langle a_{j-\sigma}^\dagger u_n | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (145)$$

В соответствии с общей схемой метода неприводимых ФГ (80)–(88) введем неприводимые ФГ согласно определению

$$\begin{aligned} &({}^{(ir)} \langle \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle)_\omega = \\ &= \langle \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega - \langle n_{i-\sigma} \rangle G_{11} + \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} \rangle \langle \langle a_{i-\sigma}^\dagger | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \end{aligned} \quad (146)$$

$$\begin{aligned} &({}^{(ir)} \langle \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^\dagger | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle)_\omega = \\ &= \langle \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^\dagger | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega - \langle n_{i\sigma} \rangle G_{21} + \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger \rangle \langle \langle a_{i\sigma} | a_{i'\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \end{aligned}$$

Таким образом, вместо алгебры операторов для нормального состояния $(a_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger, n_{i\sigma})$ для описания сверхпроводящего состояния необходимо использовать алгебру более общего вида, включающую операторы $(a_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger, n_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger, a_{i-\sigma} a_{i\sigma})$. Самосогласованная система уравнений сверхпроводимости следует из уравнения Дайсона

$$\hat{G}_{ii'}(\omega) = \hat{G}_{ii'}^0(\omega) + \sum_{jj'} \hat{G}_{ij}^0(\omega) \hat{M}_{jj'}(\omega) \hat{G}_{j'i'}(\omega). \quad (147)$$

ФГ в обобщенном приближении среднего поля G^0 и массовый оператор $M_{jj'}$ определяются следующим образом:

$$\sum_j (\omega \tau_0 \delta_{ij} - t_{ij} \tau_3 - \Sigma_{i\sigma}^c) G_{ji'}^0 = \delta_{ii'} \tau_0, \quad (148)$$

$$M_{kk'} = \sum_{jj'} (\langle \langle (\rho_{kj} \tau_3 \psi_j)^{(ir)} | (\psi_{j'}^\dagger \tau_3 \rho_{j'k'})^{(ir)} \rangle \rangle)_\omega^{(p)}, \quad (149)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_{ii'}(\omega) = & \\ = \sum_{jj'} & \begin{pmatrix} \langle\langle a_{j\uparrow} \rho_{ij\uparrow} | \rho_{j'i'\uparrow} a_{j'\uparrow}^\dagger \rangle\rangle^{(ir)(p)} & \langle\langle a_{j\uparrow} \rho_{ij\uparrow} | \rho_{j'i'\downarrow} a_{j'\downarrow} \rangle\rangle^{(ir)(p)} \\ \langle\langle a_{j\downarrow} \rho_{ij\downarrow} | \rho_{j'i'\uparrow} a_{j'\uparrow}^\dagger \rangle\rangle^{(ir)(p)} & \langle\langle a_{j\downarrow} \rho_{ij\downarrow} | \rho_{j'i'\downarrow} a_{j'\downarrow} \rangle\rangle^{(ir)(p)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (150)$$

Массовый оператор (150) описывает процессы *неупругого* рассеяния электронов на колебаниях решетки. Упругие процессы описываются величиной $\Sigma_{i\sigma}^c$ (93). Приближенное выражение для массового оператора (150) следует из следующего *пробного* решения:

$$\langle \rho_{j'i'\sigma}(t) a_{j'\sigma}^\dagger(t) a_{j\sigma} \rho_{ij\sigma} \rangle^{(ir)} \approx \langle \rho_{j'i'\sigma}(t) \rho_{ij\sigma} \rangle \langle a_{j'\sigma}^\dagger(t) a_{j\sigma} \rangle. \quad (151)$$

Данное приближение соответствует стандартному приближению в теории сверхпроводимости, которое на языке диаграммной техники соответствует пренебрежению вершинными поправками, т. е. корреляцией в распространении электронов и флуктуаций зарядовой плотности. С учетом этого приближения массовый оператор (150) запишется в виде

$$\hat{M}_{ii'}(\omega) = \hat{M}_{ii'}^1(\omega) + \hat{M}_{ii'}^2(\omega). \quad (152)$$

Первое слагаемое M^1 имеет вид, характерный для взаимодействующей электрон-фононной системы:

$$\begin{aligned} M_{ii'}^1(\omega) = \sum_{nn'} \sum_{jj'} V_{ijn} V_{j'i'n'} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \left(\text{ctg} \frac{\beta\omega_1}{2} + \text{tg} \frac{\beta\omega_2}{2} \right) \times \\ \times \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle u_n | u_{n'} \rangle\rangle_{\omega_2} \right) \left(-\frac{1}{\pi} \tau_3 \text{Im} \langle\langle \psi_j | \psi_{j'}^\dagger \rangle\rangle_{\omega_1} \tau_3 \right). \end{aligned} \quad (153)$$

Второе слагаемое $M_{ii'}^2$ имеет более сложную структуру

$$M_{ii'}^2 = \frac{U^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \left(\text{ctg} \frac{\beta\omega_1}{2} + \text{tg} \frac{\beta\omega_2}{2} \right) \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}, \quad (154)$$

где

$$\begin{aligned} m_{11} &= \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle n_{i\downarrow} | n_{i'\downarrow} \rangle\rangle_{\omega_2} \right) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle a_{i\uparrow} | a_{i'\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_{\omega_1} \right), \\ m_{12} &= \left(\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle n_{i\downarrow} | n_{i'\uparrow} \rangle\rangle_{\omega_2} \right) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle a_{i\uparrow} | a_{i'\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_{\omega_1} \right), \end{aligned} \quad (155)$$

$$m_{21} = \left(\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle n_{i\uparrow} | n_{i'\downarrow} \rangle \rangle_{\omega_2} \right) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle a_{i\downarrow} | a_{i'\uparrow}^\dagger \rangle \rangle_{\omega_1} \right),$$

$$m_{22} = \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle n_{i\uparrow} | n_{i'\uparrow} \rangle \rangle_{\omega_2} \right) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle a_{i\downarrow} | a_{i'\downarrow}^\dagger \rangle \rangle_{\omega_1} \right).$$

Определение (146) и уравнения (147)–(155) позволили провести последовательный вывод уравнений сверхпроводимости в приближении сильной связи для переходных металлов [20, 23, 183, 292] и разупорядоченных бинарных сплавов [187, 188]. Таким образом, именно адекватное описание обобщенного среднего поля в сверхпроводнике с учетом аномальных средних позволило построить компактным и самосогласованным образом уравнения сверхпроводимости в приближении сильной связи.

5.7. Теория магнитного полярона. Чтобы яснее представить себе это фундаментальное положение о сложной структуре средних полей, исследуем проблему магнитного полярона [293, 294] в магнитных полупроводниках [147], т.е. в веществах, имеющих подсистему подвижных носителей и подсистему локальных магнитных моментов [27, 293, 294]. Обычно для описания магнитных полупроводников используют s – d -обменную модель (31). При этом важно иметь в виду, что имеются различные спиновые и зарядовые степени свободы, которым соответствуют операторы: $a_{k\sigma}$, $a_{k\sigma}^\dagger$, $n_{k\sigma} = a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}$; S_k^+ , $S_{-k}^- = (S_k^+)^{\dagger}$; $b_{k\sigma} = \sum_q (S_{-q}^{-\sigma} a_{q+k-\sigma} + z_\sigma S_{-q}^z a_{q+k\sigma})$; $\sigma_k^+ = \sum_q a_{k\uparrow}^\dagger a_{k+q\downarrow}$; $\sigma_k^- = \sum_q a_{k\downarrow}^\dagger a_{k+q\uparrow}$. Полная алгебра релевантных операторов имеет вид

$$\{a_{i\sigma}, S_i^z, S_i^{-\sigma}, S_i^z a_{i\sigma}, S_i^{-\sigma} a_{i-\sigma}\}.$$

При расчете одноэлектронной функции Грина, в силу связи между подсистемами, возникают три дополнительные ФГ. Чтобы правильно описать спиновые и зарядовые степени свободы в магнитных полупроводниках и их взаимодействие, исходная ФГ должна иметь следующую матричную форму:

$$\begin{pmatrix} \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle a_{i\sigma} | S_j^z \rangle \rangle & \langle \langle a_{i\sigma} | S_j^{\sigma'} \rangle \rangle & \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger, S_j^z \rangle \rangle \\ \langle \langle S_i^z | a_{j\sigma'}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle S_i^z | S_j^z \rangle \rangle & \langle \langle S_i^z | S_j^{\sigma'} \rangle \rangle & \langle \langle S_i^z | a_{j\sigma'}^\dagger, S_j^z \rangle \rangle \\ \langle \langle S_i^{-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle S_i^{-\sigma} | S_j^z \rangle \rangle & \langle \langle S_i^{-\sigma} | S_j^{\sigma'} \rangle \rangle & \langle \langle S_i^{-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger, S_j^z \rangle \rangle \\ \langle \langle S_i^z a_{i\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle S_i^z a_{i\sigma} | S_j^z \rangle \rangle & \langle \langle S_i^z a_{i\sigma} | S_j^{\sigma'} \rangle \rangle & \langle \langle S_i^z a_{i\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger, S_j^z \rangle \rangle \\ \langle \langle S_i^{-\sigma} a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle S_i^{-\sigma} a_{i-\sigma} | S_j^z \rangle \rangle & \langle \langle S_i^{-\sigma} a_{i-\sigma} | S_j^{\sigma'} \rangle \rangle & \langle \langle S_i^{-\sigma} a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger, S_j^z \rangle \rangle \\ & & \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j-\sigma'}^\dagger, S_j^{\sigma'} \rangle \rangle \\ & & \langle \langle S_i^z | a_{j-\sigma'}^\dagger, S_j^{\sigma'} \rangle \rangle \\ & & \langle \langle S_i^{-\sigma} | a_{j-\sigma'}^\dagger, S_j^{\sigma'} \rangle \rangle \\ & & \langle \langle S_i^z a_{i\sigma} | a_{j-\sigma'}^\dagger, S_j^{\sigma'} \rangle \rangle \\ & & \langle \langle S_i^{-\sigma} a_{i-\sigma} | a_{j-\sigma'}^\dagger, S_j^{\sigma'} \rangle \rangle \end{pmatrix}. \quad (156)$$

Функциональная структура ФГ (156) показывает, что при описании квази-частичной динамики имеются два режима: режим рассеяния и режим, при котором образуются связанные состояния электрона и магнона, т. е. *магнитный полярон*. Для упрощения задачи мы будем использовать ограниченную алгебру релевантных операторов $(a_{k\sigma}, a_{k\sigma}^\dagger, b_{k\sigma}, b_{k\sigma}^\dagger)$. При этом, однако, нам потребуется отдельное согласованное рассмотрение динамики подсистемы локализованных спинов [293, 294]. Для этого используем ФГ

$$\mathcal{G}^{+-}(k; t - t') = \langle\langle S_k^+(t), S_{-k}^-(t') \rangle\rangle. \quad (157)$$

Релевантная матричная ФГ задачи о магнитной динамике приобретает вид

$$\hat{\mathcal{G}}(k; \omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle S_k^+ | S_{-k}^- \rangle\rangle & \langle\langle S_k^+ | \sigma_{-k}^- \rangle\rangle \\ \langle\langle \sigma_k^+ | S_{-k}^- \rangle\rangle & \langle\langle \sigma_k^+ | \sigma_{-k}^- \rangle\rangle \end{pmatrix}. \quad (158)$$

Уравнение Дайсона для ФГ (158)

$$\hat{\mathcal{G}} = \hat{\mathcal{G}}_0 + \hat{\mathcal{G}}_0 \hat{M} \hat{\mathcal{G}} \quad (159)$$

определяет ФГ в обобщенном приближении среднего поля $\hat{\mathcal{G}}_0$ и массовый оператор \hat{M} [294]. Для описания зарядовой подсистемы носителей используем ФГ вида

$$g_{k\sigma}(t - t') = \langle\langle a_{k\sigma}(t), a_{k\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle. \quad (160)$$

Уравнение Дайсона для этой ФГ запишется в виде [294]

$$g_{k\sigma}(\omega) = g_{k\sigma}^0(\omega) + g_{k\sigma}^0(\omega) M_{k\sigma}(\omega) g_{k\sigma}(\omega). \quad (161)$$

Уравнения (159) и (161) позволяют исследовать самосогласованным образом спиновую и зарядовую квазичастичную динамику системы. В отличие от режима рассеяния при расчете одноэлектронной ФГ (160) в режиме образования связанного состояния найдем, что ФГ в обобщенном приближении среднего поля имеет вид

$$\langle\langle a_{k\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle^0 = (\det \hat{\Omega})^{-1} = (\omega - \varepsilon(k\sigma) - I^2 N^{-1} \chi_{k\sigma}^b(\omega))^{-1}, \quad (162)$$

где

$$\chi_{k\sigma}^b(\omega) = \sum_q \left\{ \frac{\langle S_{-q}^{-\sigma} S_q^\sigma \rangle}{(1 - I\Lambda_{k\sigma}(\omega))(\omega + z_\sigma \omega(q) - \varepsilon(k + q - \sigma))} + \frac{(1 + I\Lambda_{k\sigma}(\omega)) \langle (S_{-q}^z)^{\text{ir}} (S_q^z)^{\text{ir}} \rangle}{(1 - I\Lambda_{k\sigma}(\omega))(\omega - \varepsilon(k + q\sigma))} \right\}, \quad (163)$$

$$\Lambda_{k\sigma}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{(\omega + z_\sigma \omega(q) - \varepsilon(k + q - \sigma))}. \quad (164)$$

Величина $\chi_{k\sigma}^b(\omega)$ играет роль обобщенной восприимчивости спин-электронных связанных состояний. Именно это отличает режим связанных состояний от режима рассеяния, где вместо $\chi_{k\sigma}^b(\omega)$ возникает электронная спиновая восприимчивость $\chi_0^s(k, \omega)$:

$$\chi_0^s(k, \omega) = N^{-1} \sum_p \frac{(f_{p+k\downarrow} - f_{p\uparrow})}{\omega_{p,k}}. \quad (165)$$

Используются следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \omega_{p,k} &= (\omega + \epsilon_p - \epsilon_{p+k} - \Delta_I), \quad \Delta_I = 2IS_z, \\ n_\sigma &= \frac{1}{N} \sum_q \langle a_{q\sigma}^\dagger a_{q\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_q f_{q\sigma} = \sum_q (\exp(\beta\varepsilon(q\sigma)) + 1), \end{aligned}$$

$$\varepsilon(q\sigma) = \epsilon_q - z_\sigma IS_z, \quad \bar{n} = \sum (n_\uparrow + n_\downarrow), \quad 0 \leq \bar{n} \leq 2, \quad S_z = N^{-1/2} \langle S_0^z \rangle.$$

Выражение для спектра магнитного полярона имеет вид

$$E_{k\sigma} = \varepsilon(k\sigma) + I^2 N^{-1} \chi_{k\sigma}^b(E_{k\sigma}). \quad (166)$$

Можно показать, что поляронный спектр связанного электрон-магнетонного состояния состоит из двух ветвей для любой проекции электронного спина. В так называемом *атомном пределе* ($\epsilon_k = 0$), когда $k \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$, получим

$$\langle \langle a_{k\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle^0 = \frac{S + z_\sigma S_z}{2S + 1} (\omega + IS)^{-1} + \frac{S - z_\sigma S_z}{2S + 1} (\omega - I(S + 1))^{-1}. \quad (167)$$

Здесь S и $S_z = \langle S_0^z \rangle / \sqrt{N}$ обозначают величину спина и намагниченность соответственно. Полученный результат (166) полностью соответствует результату Маттиса и Шастри [295], которые исследовали задачу о магнитном поляроне для $T = 0$

$$\langle \langle a_{k\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle^0 |_{T=0} = \left\{ \omega - \varepsilon(k\sigma) - \delta_{\sigma\downarrow} 2I^2 S \frac{\Lambda_{k\sigma}(\omega)}{(1 - I\Lambda_{k\sigma}(\omega))} \right\}^{-1}. \quad (168)$$

Итак, магнитный полярон образуется при антиферромагнитном s - d -взаимодействии ($I < 0$). Для того чтобы яснее представить себе характер спектра, рассмотрим два предельных случая:

(i) полупроводник с широкой зоной проводимости ($|I|S \ll W$)

$$\begin{aligned} E_{k\downarrow} &\simeq \epsilon_k + I \frac{S(S + S_z + 1) + S_z(S - S_z + 1)}{2S} + \\ &+ \frac{(-I)}{N} \sum_q \frac{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k + 2I(S - S_z)) \langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle}{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k + 2IS_z)} \frac{1}{2S}, \quad (169) \end{aligned}$$

(ii) полупроводник с узкой зоной проводимости ($|I|S \gg W$)

$$E_{k\downarrow} \simeq I(S+1) + \frac{2(S+1)(S+S_z)}{(2S+1)(S+S_z+1)}\epsilon_k + \frac{1}{N} \sum_q \frac{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}{(2S+1)} \frac{\langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle}{(S+S_z+1)}. \quad (170)$$

Заметим, что в этих выражениях была опущена корреляционная функция K_q^{zz} для упрощения записи. Здесь W — ширина зоны для $I=0$.

Рассмотрим теперь низкотемпературный спин-волновой режим, когда можно считать, что $S_z \simeq S$. В этом случае имеем

$$\langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle \simeq 2S(1 + N(\omega(q))).$$

Можно показать, что

(i) полупроводник с широкой зоной проводимости ($|I|S \ll W$)

$$E_{k\downarrow} \simeq \epsilon_k + IS + \frac{2I^2S}{N} \sum_q \frac{1}{(\epsilon_k - \epsilon_{k-q} + 2IS)} + \frac{(-I)}{N} \sum_q \frac{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - 2IS)} N(\omega(q)), \quad (171)$$

(ii) полупроводник с узкой зоной проводимости ($|I|S \gg W$)

$$E_{k\downarrow} \simeq I(S+1) + \frac{2S}{(2S+1)}\epsilon_k + \frac{1}{N} \sum_q \frac{2S}{(2S+1)} \frac{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}{(2S+1)} N(\omega(q)). \quad (172)$$

Оценим энергию связанного состояния магнитного полярона

$$\varepsilon_B = \varepsilon_{k\downarrow} - E_{k\downarrow}. \quad (173)$$

При этом мы принимаем во внимание, что

$$\varepsilon_{k\downarrow} = \epsilon_k + IS.$$

В результате найдем для энергии связи ε_B

(i) полупроводник с широкой зоной проводимости ($|I|S \ll W$)

$$\varepsilon_B = \varepsilon_{B1}^0 - \frac{(-I)}{N} \sum_q \frac{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - 2IS)} N(\omega(q)), \quad (174)$$

(ii) полупроводник с узкой зоной проводимости ($|I|S \gg W$)

$$\varepsilon_B = \varepsilon_{B2}^0 - \frac{1}{N} \sum_q \frac{2S}{(2S+1)} \frac{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}{(2S+1)} N(\omega(q)), \quad (175)$$

где

$$\varepsilon_{B1}^0 = \frac{(2I^2S)}{N} \sum_q \frac{1}{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - 2IS)} \simeq \frac{|I|S}{W} |I|, \quad (176)$$

$$\varepsilon_{B2}^0 = -I + \frac{\epsilon_k}{(2S+1)} \simeq |I|.$$

Изложенная теория дает полное описание магнитного полярона при конечных температурах [294], демонстрируя при этом положение о сложной структуре обобщенных средних полей, которые не сводятся к простому функционалу средних плотностей спинов и частиц.

6. НАРУШЕННАЯ СИММЕТРИЯ, КВАЗИСРЕДНИЕ И ФИЗИКА МАГНЕТИЗМА

Известно, что концепция спонтанно нарушенной симметрии [296–305] является одним из важнейших понятий квантовой теории поля и теории элементарных частиц на их пути к созданию единой теории поля, объединяющей различные силы природы [306]. Следует подчеркнуть, что понятие спонтанно нарушенной симметрии пришло в эту теорию из квантовой теории твердого тела. Понятие спонтанно нарушенной симметрии, возникнув в квантовой теории магнетизма, получило в дальнейшем значительное развитие и широкое применение в калибровочных теориях элементарных частиц [307, 308]. Именно в квантовой теории поля связанные с этой концепцией представления получили весьма существенное развитие и обобщение. Известна аналогия между механизмом Хиггса возникновения массы в теории элементарных частиц и эффектом Мейсснера в теории сверхпроводимости Гинзбурга–Ландау [296, 297, 300–302, 305, 309]. Оба эффекта являются следствием спонтанно нарушенной симметрии в системе, состоящей из двух взаимодействующих подсистем. Похожая ситуация встречается и в квантовой теории твердого тела [310]. Аналогии между теориями элементарных частиц и твердого тела имеют как познавательное, так и практическое значение для их развития [311]. Мы уже говорили об аналогиях с эффектом Хиггса, играющим большую роль в этих теориях [312]. Однако с таким же основанием можно было рассматривать аналогии с эффектом Мейсснера в модели сверхпроводимости Гинзбурга–Ландау, поскольку модель Хиггса, в свою очередь, является лишь релятивистским аналогом этой

модели [296, 300–302, 305]. С этих позиций можно рассмотреть существование магнонов при низких температурах в спиновых системах [313], акустических и оптических мод колебаний в решетке с базисом или в многоподрешеточном магнетике, а также спектр связанных колебаний электронных и ядерных спинов в магнитоупорядоченных кристаллах и т. п. [314]. Изотропный ферромагнетик Гейзенберга (12) обычно используется как пример системы, в которой нарушена симметрия [304]. Под этим понимается, что симметрия гамильтониана — инвариантность по отношению к преобразованию вращения — не является симметрией состояния. В самом деле, ферромагнитное состояние системы характеризуется осью преимущественной ориентации спинов и поэтому имеет более низкую симметрию, чем ее гамильтониан. Однако, как было подчеркнуто Андерсоном [310, 315, 316], в гейзенберговском ферромагнетике основное состояние является собственным состоянием соответствующей (relevant) непрерывной симметрии (спиновых вращений). Поэтому *симметрия не нарушается* и низкоэнергетические возбуждения не имеют новых свойств. Нарушение симметрии имеет место, когда основное состояние не является собственным состоянием исходной группы, как в антиферромагнетике или в сверхпроводнике. Только в этом случае концепции квазивырождения, голдстоуновских бозонов и явления Хиггса могут быть применимы [310, 315, 316]. В статье нобелевского лауреата 2008 г. Й. Намбу [317], посвященной развитию теории элементарных частиц и созданию концепции спонтанного нарушения симметрии, отмечена существенная роль физики магнетизма в использовании идеи симметрии. Намбу замечает, что еще в конце XIX в. П. Кюри [318, 319] использовал принципы симметрии в физике конденсированного состояния вещества. П. Кюри [318] использовал соображения симметрии, чтобы получить аналог *правил отбора* для физических эффектов, например для эффекта Видемана [318, 319] (см. книги [319–321]). Намбу также отмечает: «... Примеры, более существенные для нашей темы, возникли уже после работы Кюри. Ферромагнетизм является прототипом для современной концепции спонтанного нарушения симметрии, как это было объяснено в работах Вейсса [36], Гейзенберга [98] и др. С тех пор ферромагнетизм служит для нас как стандартная математическая модель спонтанного нарушения симметрии». Это утверждение Намбу необходимо понимать с учетом разъяснения Андерсона [310, 315, 316] (см. также работу [322]). П. Кюри действительно был предшественником современных концепций квантовой теории магнетизма. Им был сформулирован *принцип Кюри: диссимметрия творит явление*. Согласно этому принципу [318, 319], «... явление может существовать в среде, обладающей характеристической симметрией (G_1) или симметрией одной из подгрупп его характеристической симметрии ($G \subseteq G_i$)». Иными словами, некоторые элементы симметрии могут сосуществовать с некоторыми явлениями, но это не обязательно. Необходимо, чтобы некоторые элементы симметрии отсутствовали. Это и есть

та *диссимметрия*, которая *творит явление*. По А. В. Шубникову, диссимметрия есть «выпадение» некоторых элементов симметрии, которыми обладало тело или явление до оказанного на него воздействия. Исчезнувшие элементы симметрии существуют в скрытом виде и при благоприятных условиях могут проявиться. Отсюда и вытекает принцип Кюри.

Формулировка принципа диссимметризации имеет вид [323]

$$G_i^{\text{phenomena}} \supseteq G_{\text{media}} = \bigcap G_i^{\text{phenomena}}, \quad (177)$$

или в другой форме

$$G_i^{\text{properties}} \supseteq G_{\text{object}} = \bigcap G_i^{\text{properties}}. \quad (178)$$

Заметим, что концепции симметрии, диссимметрии и нарушенной симметрии получили очень широкое распространение в различных отраслях науки и искусства [323–325].

Существенное продвижение в понимании концепции спонтанного нарушения симметрии связано с идеями Н. Н. Боголюбова о *квазисредних* [326, 327]. В самом деле, в книге [304] отмечается: «... канонический ансамбль $\rho \sim \exp(-\beta H)$ больше не является хорошим ансамблем для спонтанно упорядоченной системы. При усреднении по этому ансамблю необходимо усреднить и по всем направлениям полного спина. Канонический ансамбль хорош в парамагнетике и пригоден для многих целей в ферромагнитном состоянии, но было бы глупо применять его, например, для вычисления $\langle \mathbf{S}^{\text{tot}} \rangle$. Можно использовать $\exp(-\beta H)$ как статистический вес состояний различной энергии, но при этом необходимо дополнительно учитывать, что след должен браться только по тем состояниям, для которых \mathbf{S}^{tot} направлен вдоль оси z . Формально необходимо иметь что-то вроде

$$\rho = \text{const } \mathcal{P} \mathbf{S}^{\text{tot}} \exp(-\beta H),$$

где проекционный оператор $\mathcal{P} \mathbf{S}^{\text{tot}}$ отбирает только те состояния, для которых \mathbf{S}^{tot} направлен вдоль оси z ». Как видно, в этом утверждении, написанном в 1975 г., содержится в сжатом виде аргументация о необходимости использования представления о *квазисредних* [326, 327], без их явного упоминания. Между тем представление о квазисредних [326] было сформулировано Н. Н. Боголюбовым еще в 1961 г. (см. также работу [303]). Интересно подчеркнуть, что исходным пунктом работы Н. Н. Боголюбова было исследование аддитивных законов сохранения и *правил отбора*, продолжающих и развивающих подход П. Кюри по выводу правил отбора для физических эффектов, о котором говорилось выше. Н. Н. Боголюбовым было показано, что в том случае, когда состояние статистического равновесия в системе является вырожденным, как в ферромагнетике, можно снять вырождение состояния статистического равновесия по отношению к группе вращения спина,

включив в гамильтониан H дополнительный неинвариантный член $\nu M_z V$ с бесконечно малым ν . При этом вместо обычных средних возникают *квази-средние* [326, 327] вида

$$\simeq A \simeq = \lim_{\nu \rightarrow 0} \langle A \rangle_{\nu e}, \quad (179)$$

где $\langle A \rangle_{\nu e}$ — обычное среднее от A при гамильтониане $H_{\nu e} = H + \nu(\mathbf{e} \cdot \mathbf{M})V$. Таким образом, наличие вырождения непосредственно отражается на квазисредних их зависимостью от произвольного орта \mathbf{e} . Обычные средние при этом представляют собой те же квазисредние, только усредненные по всем направлениям \mathbf{e} :

$$\langle A \rangle = \int \simeq A \simeq d\mathbf{e}. \quad (180)$$

В работах автора [20, 255, 289] изучался вопрос о нарушенной симметрии в локализованной и зонной моделях антиферромагнетизма. При этом выяснилось, что концепция спонтанного нарушения симметрии для зонной модели магнетизма [255] намного сложнее, чем для локализованной модели. В рамках зонной модели магнетизма необходимо дополнительно включать в рассмотрение так называемые *аномальные пропагаторы* вида

$$\begin{aligned} \text{FM} : G_{fm} &\sim \langle \langle a_{k\sigma}; a_{k-\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \\ \text{AFM} : G_{afm} &\sim \langle \langle a_{k+Q\sigma}; a_{k+Q'\sigma'}^\dagger \rangle \rangle. \end{aligned}$$

В случае зонного антиферромагнетика основному состоянию системы отвечает волна спиновой плотности (SDW); при этом частица при рассеянии на периодическом внутреннем неоднородном поле приобретает импульс $Q - Q'$ и меняет свой спин: $\sigma \rightarrow \sigma'$. Параметры дальнего порядка определяются следующим образом:

$$\text{FM} : m = 1/N \sum_{k\sigma} \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k-\sigma} \rangle, \quad (181)$$

$$\text{AFM} : M_Q = \sum_{k\sigma} \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k+Q-\sigma} \rangle. \quad (182)$$

Важно подчеркнуть, что параметры дальнего порядка являются функциями внутреннего поля, которое, в свою очередь, является функцией параметра порядка. Таким образом, к гамильтониану зонного ферро- или антиферромагнетика, обладающего ротационной и трансляционной инвариантностью, необходимо добавить бесконечно малые *источники*, снимающие вырождение:

$$\text{FM} : \nu \mu_B H_x \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger a_{k-\sigma}, \quad (183)$$

$$\text{AFM} : \nu \mu_B H \sum_{kQ} a_{k\sigma}^\dagger a_{k+Q-\sigma}. \quad (184)$$

Здесь $\nu \rightarrow 0$ после предельного перехода статистической механики $V \rightarrow \infty$.

Основное состояние в виде волны спиновой плотности было впервые получено Оверхаузером [328] при исследовании ядерной материи. При этом вектор \mathbf{Q} является мерой неоднородности или нарушения трансляционной инвариантности системы. В работе [329] (см. также [330–332]) говорится, что в антиферромагнетике «...чередующееся магнитное поле играет роль поля, нарушающего симметрию. Не существует механизма, позволяющего генерировать реальное чередующееся магнитное поле в антиферромагнитных материалах». Анализ, проведенный в работах Пенна [333, 334], показал (см. также [335]), что антиферромагнитное состояние и более сложные состояния (например, ферромагнитное) можно описать в рамках *обобщенного приближения среднего поля*. При этом необходимо учитывать как нормальные средние $\langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \rangle$, так и *аномальные средние* $\langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} \rangle$. Ясно, что аномальные члены (183) и (184) нарушают исходную ротационную симметрию гамильтониана Хаббарда. Таким образом, обобщенное приближение среднего поля имеет вид $n_{i-\sigma} a_{i\sigma} \simeq \langle n_{i-\sigma} \rangle a_{i\sigma} - \langle a_{i-\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \rangle a_{i-\sigma}$. В работах автора [20, 255] была построена самосогласованная теория зонного антиферромагнетизма на основе метода неприводимых ФГ. Использовалось следующее определение:

$$\begin{aligned} \text{ir} \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= \langle \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega - \\ &- \delta_{p,0} \langle n_{q-\sigma} \rangle G_{k\sigma} - \langle a_{k+p\sigma} a_{p+q-\sigma}^\dagger \rangle \langle \langle a_{q-\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \end{aligned} \quad (185)$$

Алгебра релевантных операторов должна быть выбрана в виде $(a_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger, n_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma})$. Соответствующая исходная ФГ будет иметь матричную структуру

$$\begin{pmatrix} \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j-\sigma}^\dagger \rangle \rangle \\ \langle \langle a_{i-\sigma} | a_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle & \langle \langle a_{i-\sigma} | a_{j-\sigma}^\dagger \rangle \rangle \end{pmatrix}.$$

Недиагональные члены фиксируют вакуумное состояние зонного антиферромагнетика в виде волны спиновой плотности. Необходимо подчеркнуть, что проблема зонного антиферромагнетизма [157, 336] весьма сложна и последовательная микроскопическая теория этого явления остается актуальной задачей.

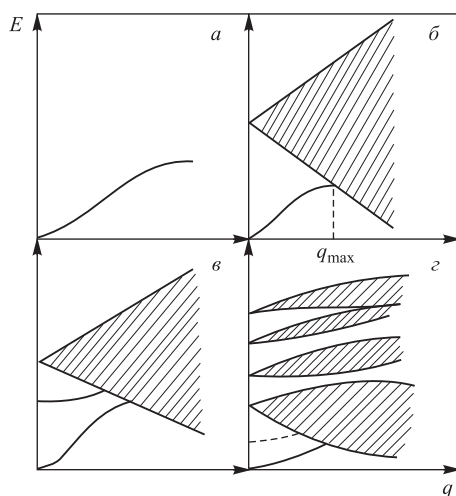
6.1. Квантовый протекторат и микроскопические модели магнетизма. Концепция «квантового протектората» была сформулирована в работе [216]. Ее авторы Р.Лафлин и Д.Пайнс обсуждают наиболее фундаментальные принципы описания вещества (материи, matter) в самом широком смысле этого слова: «Возможно выполнить приближенные расчеты для систем больших размеров; именно благодаря таким расчетам было выяснено, почему атомы имеют тот размер, который они имеют, почему химические связи имеют ту длину и прочность, которые они имеют, почему твердое вещество имеет те свойства упругости, которые оно имеет, почему некоторые

материалы прозрачны, а другие отражают или поглощают свет. Возможно также предсказать атомные конформации небольших молекул, скорости простых химических реакций, структурные фазовые переходы, ферромагнетизм и, иногда, даже температуру сверхпроводящего перехода, привлекая в качестве направляющих некоторое количество экспериментальных данных. Однако эти приближенные схемы не являются расчетами на основе первых принципов, но, скорее, являются неким родом ремесла, предназначенным для объяснения эксперимента. Поэтому по своей сути они склонны быть в наименьшей степени надежным инструментом именно тогда, когда надежность и достоверность особенно необходимы, т. е. тогда, когда экспериментальная информация скудна и недостаточна, физическое поведение не имеет аналогов и ключевые вопросы все еще не сформулированы ясно. . . Мы успешно свели все обычное физическое поведение к простой, корректной Теории Всего только для того, чтобы обнаружить, что эта теория не в состоянии открыть абсолютно ничего о множестве вещей и явлений очень большого значения» [216].

Р. Лафлин и Д. Пайнс показывают, что существуют факты, которые являются истинными (например, значение e^2/hc), но они не могут быть получены, исходя из Теории Всего, потому что приближенная теория не может предсказать точный результат, а значит, существуют некоторые высшие принципы, которые имеют более глубокую природу, чем та или иная микроскопическая схема. Далее авторы формулируют свой главный тезис: *возникающие* физические явления [217], которые регулируются высшими физическими принципами, имеют некоторое свойство, характерное именно для этих явлений. Это свойство — их нечувствительность к микроскопическому описанию. Таким образом, здесь, по существу, ставится важнейший вопрос о том, что является познаваемым (постижимым) в самом глубоком смысле этого слова. Например, низкоэнергетический спектр возбуждений обычного кристаллического диэлектрика состоит из поперечной и продольной звуковых волн и ничего более, вне зависимости от деталей (см. также [217]). Поэтому, по мнению Р. Лафлина и Д. Пайнса, нет нужды «доказывать» существование звука в твердом теле; это есть следствие существования упругих модулей на шкале больших длин, что, в свою очередь, вытекает из спонтанного нарушения трансляционной и ротационной симметрии, характеризующей кристаллическое состояние. Из этого следует обратное утверждение: мало что можно узнать об атомном строении кристаллических твердых тел, исследуя их акустические свойства. Поэтому, суммируют авторы, кристаллическое состояние есть простейший известный пример *квантового протектора* — стабильного состояния вещества, низкоэнергетические свойства которого определяются высшими физическими принципами и ничем более.

Существование двух шкал, низкоэнергетической и высокоэнергетической, при описании магнитных явлений было подчеркнуто в работах автора [18, 19,

189] при сравнительном исследовании локализованных и зонных квантовых моделей магнетизма. Было показано, что низкоэнергетический спектр магнитных возбуждений в магнитоупорядоченных твердых телах представляет собой гидродинамический полюс ($\mathbf{k}, \omega \rightarrow 0$) обобщенной спиновой восприимчивости и присутствует в модели Гейзенберга, Хаббарда и комбинированной $s-d$ -модели (см. рисунок). В зонной модели Стонера гидродинамический полюс



Схематический вид спектра возбуждений в четырех микроскопических моделях магнетизма: а) модель Гейзенберга; б) модель Хаббарда; в) модель Зенера; г) многозонная модель Хаббарда

отсутствует; в ней нет спиновых волн. В свою очередь, стонеровские одночастичные возбуждения отсутствуют в спектре модели Гейзенберга. Модель Хаббарда [18, 19, 189] узких энергетических зон содержит оба типа возбуждений: коллективные спиновые волны (низкоэнергетический спектр) и стонеровские одночастичные возбуждения (высокоэнергетический спектр). В этом состоит большое преимущество модели Хаббарда и ее большая гибкость по сравнению с моделью Гейзенберга. Последняя тем не менее есть очень хорошее приближение к реальному поведению в области применимости гидродинамического описания, т. е. при больших длинах волн и малых энергиях. Применение концепции квантового протектората к квантовой теории магнетизма было дано в работе автора [189]. При этом удалось сформулировать критерий применимости квантовых моделей магнетизма к конкретным веществам на основе анализа их низкоэнергетического и высокоэнергетического спектров.

6.2. Модель Лоуренса–Дониаха. Особой формой теории среднего поля является модель Гинзбурга–Ландау [309, 337]. Модель Гинзбурга–Ландау оперирует с *псевдодолновой* функцией $\Psi(\mathbf{r})$, которая играет роль комплексного параметра порядка, причем квадрат модуля этой функции $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ должен был представлять локальную плотность сверхпроводящих электронов. Известно, что условиями применимости теории Гинзбурга–Ландау являются достаточная близость температуры к критической температуре T_c и требование, чтобы пространственные изменения функции Ψ и векторного потенциала \mathbf{A} были не слишком сильными. Основным допущением в подходе Гинзбурга–Ландау является возможность разложения плотности свободной энергии f в ряд при условии, что значения Ψ малы и она медленно меняется в пространстве. При этом получаем

$$f = f_{n0} + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar\nabla + \frac{2e\mathbf{A}}{c} \right) \Psi \right|^2 + \frac{\hbar^2}{8\pi}. \quad (186)$$

Уравнения Гинзбурга–Ландау следуют из применения вариационного метода к предложенному разложению плотности свободной энергии по степеням $|\Psi|^2$ и $|\nabla\Psi|^2$, что приводит к двум связанным дифференциальным уравнениям для $\Psi(\mathbf{r})$ и векторного потенциала \mathbf{A} .

Модель Лоуренса–Дониаха была сформулирована в работе [338] для анализа роли слоистой структуры [339–341] в сверхпроводящих материалах. В рамках этой модели рассматривается стопка параллельных двумерных сверхпроводящих слоев, разделенных изолирующим материалом (или вакуумом), которые нелинейно связаны между собой; при этом учитывается приложенное магнитное поле. В некотором смысле модель Лоуренса–Дониаха можно считать анизотропным вариантом модели Гинзбурга–Ландау [309, 337]. Более точно, анизотропная модель Гинзбурга–Ландау может рассматриваться как некое приближение модели Лоуренса–Дониаха в непрерывном пределе. Однако, когда длина когерентности в направлении, перпендикулярном слоям, меньше чем расстояние между слоями, эти две модели не могут быть сопоставлены.

В рамках подхода, который использовали Лоуренс и Дониах, рассмотренные сверхпроводящие свойства слоистых структур основывалось на предположении, что плотность свободной энергии, приходящаяся на одну ячейку в сверхпроводящем состоянии, по отношению к этой же величине в нулевом поле может быть записана в следующем виде:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_i^n \left[\alpha_i(T) |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 + \beta |\Psi_i(\mathbf{r})|^4 + \frac{1}{2m_{ab}} \left| \left(-i\hbar\nabla + \frac{2e\mathbf{A}}{c} \right) \Psi_i(\mathbf{r}) \right|^2 \right] + \sum_{\langle ij \rangle} \eta_{ij} |\Psi_i(\mathbf{r}) - \Psi_j(\mathbf{r})|^2. \quad (187)$$

Здесь $\Psi_i(\mathbf{r})$ — параметр порядка Гинзбурга–Ландау i -го слоя ($\Psi_i(x, y)$ — двумерная функция), оператор ∇ действует в плоскости x – y ; \mathbf{A} — соответствующий векторный потенциал, α и β — обычные параметры Гинзбурга–Ландау, η_{ij} описывает положительную джозефсоновскую связь между слоями; $\langle ij \rangle$ обозначает сумму по ближайшим соседним парам слоев. Считается, что слои отвечают плоскостям ab , а ось c перпендикулярна к этим плоскостям. Соответственно этому ось z направлена вдоль c , а координаты x – y лежат в плоскости ab . Величина η_{ij} обычно записывается в виде:

$$\eta_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m_c s^2}. \quad (188)$$

Здесь s — расстояние между слоями. Как видно, при строгом рассмотрении нужно учитывать анизотропию эффективных масс в плоскости ab m_{ab} и между плоскостями m_c . Часто этим различием пренебрегают и рассматривают квазиизотропный случай. Если записать Ψ_i в виде $\Psi_i = |\Psi_i| \exp(i\varphi_i)$ и предположить, что все $|\Psi_i|$ равны, то η_{ij} примет вид

$$\eta_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m_c s^2} |\Psi_i|^2 [1 - \cos(\varphi_i - \varphi_{i-1})]. \quad (189)$$

Коэффициент $\alpha_i(T)$ для i -го слоя имеет вид

$$\alpha_i(T) = \alpha'_i \frac{(T - T_i^0)}{T_i^0}, \quad (190)$$

где T_i^0 обозначает критическую температуру i -го слоя. Далее возможно рассмотреть ситуацию, когда $\Psi_i(\mathbf{r}) = \Psi_i(r)$ и $\mathbf{A} = 0$. Вблизи T_c вклад $\beta|\Psi_i|^4$ является малым. С учетом этих упрощений плотность свободной энергии можно переписать в виде

$$f = \sum_i^n \alpha_i(T) |\Psi_i|^2 + \sum_{\langle ij \rangle} \eta_{ij} |\Psi_i - \Psi_j|^2. \quad (191)$$

Данное приближение отвечает *квазиизотропному* приближению с одним массовым параметром α . Уравнения Гинзбурга–Ландау следуют из условий экстремума свободной энергии по отношению к вариации Ψ_i

$$\frac{\delta f}{\delta \Psi_i^*} = (\alpha_i + \eta_{i-1 i} + \eta_{i i-1}) \Psi_i - (\eta_{i-1 i} \Psi_{i-1} + \eta_{i i+1} \Psi_{i+1}) = 0. \quad (192)$$

Соответствующее секулярное уравнение приобретает следующую форму:

$$\left| (\alpha_i(T) + \eta_{i-1 i} + \eta_{i i+1}) \delta_{ij} - \eta_{ij} \delta_{i j \pm 1} \right| = 0. \quad (193)$$

В рамках модели Лоуренса–Дониаха [338] считается, что температура перехода соответствует наибольшему корню секулярного уравнения. Другими словами, нужно исследовать решения уравнения

$$\left| \left(T - T_i^0 + \frac{\eta_{i-1} T_i^0}{\alpha'_i} + \frac{\eta_{i+1} T_i^0}{\alpha'_i} \right) \delta_{ij} - \frac{\eta_{ij} T_i^0}{\alpha'_i} \delta_{i, j \pm 1} \right| = 0 \quad (194)$$

или, в другой форме,

$$\det(TI - M) = 0,$$

где

$$M_{ij} = \left(T_i^0 - \frac{\eta_{i-1} T_i^0}{\alpha'_i} - \frac{\eta_{i+1} T_i^0}{\alpha'_i} \right) \delta_{ij} + \frac{\eta_{ij} T_i^0}{\alpha'_i} \delta_{i, j \pm 1}. \quad (195)$$

Таким образом, проблема сводится к нахождению максимального собственного значения матрицы M . С учетом внешнего поля полная форма уравнения Лоуренса–Дониаха [338] запишется в виде

$$\alpha \Psi_i + \beta |\Psi_i|^2 \Psi_i - \frac{\hbar^2}{2m_{ab}} \left(\nabla + i \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi_i - \frac{\hbar^2}{2m_c s^2} \left(\Psi_{i+1} e^{2ieA_z s / \hbar c} - 2\Psi_i - \Psi_{i-1} e^{2ieA_z s / \hbar c} \right) = 0. \quad (196)$$

Исследованию модели Лоуренса–Дониаха и различным методам ее решения посвящено большое число работ [339–344]. Во многих отношениях эта модель соответствует слоистой структуре высокотемпературных сверхпроводников [345], в особенности меркурокупратов [339–341]. В работе [312] изучалась релятивистская версия модели Лоуренса–Дониаха. Рассматривалось нарушение локальной $U(1)$ калибровочной симметрии по аналогии с механизмом Хиггса [302]. При этом происходит спонтанное нарушение глобальной $U(1)$ -инвариантности посредством образования сверхпроводящего конденсата. В работе детально изучены следствия спонтанного нарушения симметрии в связи с явлением Андерсона–Хиггса [302]. Как уже упоминалось, концепция спонтанного нарушения симметрии отвечает ситуации с симметричным действием, но асимметричной реализацией (вакуумный конденсат) в низкоэнергетическом режиме; таким образом, эффект имеет более низкую симметрию, чем вызвавшая его причина [301, 307]. Механизм Хиггса [302], по существу, вытекает из идеи Андерсона [301] о связи нарушения калибровочной инвариантности и возникновения коллективной моды нулевой массы в сверхпроводнике. В работе [312] также были получены дифференциально-разностные уравнения для параметра порядка, а также для векторного потенциала в плоскости и между плоскостями. Эти уравнения соответствуют уравнениям Клейна–Гордона, Прока и синус-Гордона. Проведено

сравнение со стандартным уравнением синус-Гордона для сверхпроводящего сдвига фазы $(\varphi_i - \varphi_{i-1})$ между слоями в лондоновском пределе. Рассмотрена возможность применения данного подхода для описания высокотемпературной сверхпроводимости в слоистых купратах с одной плоскостью в элементарной ячейке и слабой джозефсоновской связью между слоями. Таким образом, на основе принципов ковариантности и калибровочной инвариантности, исходя из четырехмерного обобщенного варианта модели Лоуренса–Дониаха, удается построить последовательную схему феноменологического описания макроскопического поведения слоистых сверхпроводников. Механизм Хиггса [302] является именно той руководящей идеей, которая позволяет дать глубокое и нетривиальное обоснование данного подхода. При этом удивительная внешняя простота модели Лоуренса–Дониаха еще раз подчеркивает мысль Р. Пайерлса [93] об эффективности построения физических моделей.

7. НЕРАВНОВЕСНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ И КВАЗИСРЕДНИЕ В ТЕОРИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Ранее было показано, что в равновесной статистической механике очень большое значение имеет концепция Н. Н. Боголюбова о квазисредних [326, 327]. Согласно этой концепции бесконечно малые возмущения могут оказывать существенные воздействия на систему, если они нарушают какую-либо симметрию, снимая вырождение (или квазивырождение). В результате они могут дать конечные эффекты при условии их стремления к нулю после термодинамического предельного перехода. Д. Н. Зубаревым было показано [346, 347], что нарушающие симметрию возмущения и концепция квазисредних имеют существенное значение и для теории необратимых процессов [38]. Метод построения неравновесного статистического оператора [38] в рамках представления о квазисредних приобретает большую прозрачность и глубину. Основная идея работ [346, 347] состояла в том, чтобы рассматривать бесконечно малые источники, нарушающие симметрию уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial \rho(t, 0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho(t, 0), H] = 0 \quad (197)$$

относительно обращения времени, которые будут стремиться к нулю после термодинамического предельного перехода. Основная идея метода неравновесного статистического оператора (НСО) [38] состоит в том, что для не слишком малых масштабов времени для описания неравновесного состояния системы достаточно некоторого набора параметров $F_m(t)$ и можно найти такое частное решение уравнения Лиувилля (197), которое зависит от времени лишь через $F_m(t)$. Первый аргумент $\rho(t, 0)$ указывает на неявную зависимость от времени. Предполагается, что неравновесный статистический ансамбль

можно охарактеризовать небольшим набором *релевантных* операторов $P_m(t)$ (квазиинтегралов движения); при этом НСО будет функционалом $P_m(t)$

$$\rho(t) = \rho\{\dots P_m(t) \dots\}. \quad (198)$$

Можно показать [38], что если статистический оператор $\rho(t, 0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля, то он совпадает с

$$\rho = \exp \left[\Lambda - \int_{-\infty}^0 dt_1 \sum_m G_m(t_1) P_m(t_1) \right]; \quad \Lambda = 1 - \lambda, \quad (199)$$

где

$$G_m(t_1) = \varepsilon e^{\varepsilon t_1} F_m(t + t_1), \quad (200)$$

$$\Lambda = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \lambda(t + t_1) = \lambda(t) - \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \dot{\lambda}(t + t_1). \quad (201)$$

В другом виде это можно записать как

$$\begin{aligned} \rho &= \exp(\overline{\ln \rho_q}) = \exp \left[\varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \exp\left(\frac{iHt_1}{\hbar}\right) \ln \rho_q(t + t_1) \exp\left(\frac{-iHt_1}{\hbar}\right) \right] = \\ &= \exp(-\overline{S(t, 0)}) = \exp \left[-\varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} S(t + t_1, t_1) \right] = \\ &= \exp \left[-S(t, 0) + \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \dot{S}(t + t_1, t_1) \right], \quad (202) \end{aligned}$$

где

$$\rho_q = \exp \left(\Omega - \sum_m F_m(t) P_m \right) \equiv \exp[-S(t, 0)], \quad (203)$$

$$\Omega = \ln \text{Tr} \exp \left(- \sum_m F_m(t) P_m \right),$$

$$\dot{S}(t, 0) = \frac{\partial S(t, 0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [S(t, 0), H]; \quad (204)$$

$$\dot{S}(t, t_1) = \exp\left(\frac{iHt_1}{\hbar}\right) \dot{S}(t, 0) \exp\left(\frac{-iHt_1}{\hbar}\right).$$

Здесь ρ_q — квазиравновесный статистический оператор, который соответствует экстремальному значению информационной энтропии

$$S = -\text{Tr}(\rho \ln \rho), \quad (205)$$

при дополнительных условиях постоянства $\text{Tr}(\rho P_m) = \langle P_m \rangle_q$; $\text{Tr} \rho = 1$. В этом случае

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_m} = -\langle P_m \rangle_q; \quad \langle \dots \rangle_q = \text{Tr}(\rho_q \dots), \quad (206)$$

$$\Phi(\rho) = -\text{Tr}(\rho \ln \rho) - \sum_m F_m \text{Tr}(\rho P_m) + \lambda \text{Tr} \rho, \quad (207)$$

$$\langle P_m \rangle^t = \langle P_m \rangle_q^t. \quad (208)$$

Квантовое уравнение Лиувилля (197) (так же как и классическое) инвариантно по отношению изменения знака времени. Можно показать [346, 347], что $\rho(t, 0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля, но с бесконечно малым источником в правой части, пропорциональным ε , которое устремляется к нулю после термодинамического предельного перехода. В самом деле, рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial \rho_\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\varepsilon, H] = -\varepsilon(\rho_\varepsilon - \rho_q) \quad (209)$$

или, в другой форме,

$$\frac{\partial \ln \rho_\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\ln \rho_\varepsilon, H] = -\varepsilon(\ln \rho_\varepsilon - \ln \rho_q), \quad (210)$$

где $\varepsilon \rightarrow 0$ после термодинамического предельного перехода. Уравнение (209) является аналогом соответствующего уравнения в квантовой теории рассеяния [348, 349]. Введение бесконечно малых источников в уравнение Лиувилля соответствует наложению граничных условий

$$\exp\left(\frac{iHt_1}{\hbar}\right) (\rho(t+t_1) - \rho_q(t+t_1)) \exp\left(\frac{-iHt_1}{\hbar}\right) \rightarrow 0. \quad (211)$$

Здесь $t_1 \rightarrow -\infty$ после термодинамического предельного перехода. В работах [38, 346, 347] было показано, что оператор ρ_ε имеет вид

$$\rho_\varepsilon(t, t) = \varepsilon \int_{-\infty}^t dt_1 e^{\varepsilon(t_1-t)} \rho_q(t_1, t_1) = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \rho_q(t+t_1, t+t_1). \quad (212)$$

Здесь первый аргумент $\rho(t, t)$ обозначает косвенную зависимость от времени через параметры $F_m(t)$ и второй аргумент обозначает зависимость от времени через представление Гейзенберга. Искомый статистический оператор

определяется следующим образом:

$$\rho_\varepsilon = \rho_\varepsilon(t, 0) = \overline{\rho_q(t, 0)} = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \rho_q(t + t_1, t_1). \quad (213)$$

В результате неравновесный статистический оператор примет вид

$$\begin{aligned} \rho &= Q^{-1} \exp \left(- \sum_m B_m \right) = \\ &= Q^{-1} \exp \left[- \sum_m \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} (F_m(t + t_1) P_m(t_1)) \right] = \\ &= Q^{-1} \exp \left(- \sum_m F_m(t) P_m + \right. \\ &\quad \left. + \sum_m \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} [\dot{F}_m(t + t_1) P_m(t_1) + F_m(t + t_1) \dot{P}_m(t_1)] \right). \end{aligned} \quad (214)$$

Запишем уравнение (210) в следующей форме:

$$\frac{d}{dt} (e^{\varepsilon t} \ln \rho(t, t)) = \varepsilon e^{\varepsilon t} \ln \rho_q(t, t), \quad (215)$$

где

$$\ln \rho(t, t) = U^\dagger(t, 0) \ln \rho(t, 0) U(t, 0); \quad U(t, 0) = \exp \left(\frac{iHt}{\hbar} \right). \quad (216)$$

После интегрирования уравнения (215) в интервале $(-\infty, 0)$ получим

$$\ln \rho(t, t) = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \ln \rho_q(t + t_1, t + t_1). \quad (217)$$

Предполагается, что $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \ln \rho(t, t) = 0$. В результате получим

$$\begin{aligned} \rho(t, 0) &= \exp \left(- \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \ln \rho_q(t + t_1, t_1) \right) = \\ &= \exp \overline{(\ln \rho_q(t, 0))} \equiv \exp \overline{(-S(t, 0))}. \end{aligned} \quad (218)$$

Среднее значение любой динамической переменной A будет иметь вид

$$\langle A \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Tr} (\rho(t, 0)A). \quad (219)$$

Как видно, это среднее значение фактически не что иное, как *квазисреднее*. Нормировка квазиравновесного распределения ρ_q будет сохраняться при условии

$$\text{Tr} (\rho(t, 0)P_m) = \langle P_m \rangle = \langle P_m \rangle_q; \quad \text{Tr} \rho = 1. \quad (220)$$

Таким образом, можно утверждать, что появление эффекта необратимости тесно связано с нарушением симметрии времени [350], а также с идеей квазисредних в статистической механике [38, 346, 347].

7.1. Обобщенные кинетические уравнения. Метод НСО [38] получил широкое применение в различных задачах статистической механики. Большой вклад в разработку теории кинетических уравнений в рамках метода НСО был внесен Л. А. Покровским [351–353]. Обобщенные кинетические уравнения переноса, описывающие эволюцию переменных $\langle P_m \rangle$ и $F_m(t)$ во времени, получаются путем усреднения уравнений движения для P_m с найденным НСО

$$\langle P_m \rangle = -\frac{\delta \Omega}{\delta F_m(t)}; \quad F_m(t) = \frac{\delta S}{\delta \langle P_m \rangle}. \quad (221)$$

Обобщенные уравнения переноса имеют вид

$$\langle \dot{P}_m \rangle = -\sum_n \frac{\delta^2 \Omega}{\delta F_m(t) \delta F_n(t)} \dot{F}_n(t); \quad \dot{F}_m(t) = \sum_n \frac{\delta^2 S}{\delta \langle P_m \rangle \delta \langle P_n \rangle} \langle \dot{P}_n \rangle. \quad (222)$$

При этом производство энтропии запишется в виде

$$\dot{S}(t) = \langle \dot{S}(t, 0) \rangle = -\sum_m \langle \dot{P}_m \rangle F_m(t) = -\sum_{n,m} \frac{\delta^2 \Omega}{\delta F_m(t) \delta F_n(t)} \dot{F}_n(t) F_m(t). \quad (223)$$

Уравнения (222) являются взаимно сопряженными и вместе с уравнением (223) образуют полную систему уравнений для вычисления величин $\langle P_m \rangle$ и F_m .

Следуя работе [353], запишем кинетические уравнения для системы со слабым взаимодействием. Гамильтониан имеет вид

$$H = H_0 + V. \quad (224)$$

Здесь H_0 — гамильтониан невзаимодействующих частиц (или квазичастиц); V — оператор взаимодействия. В качестве релевантных операторов выберем набор операторов $P_m = P_k$ в виде $a_k^\dagger a_k$ или $a_k^\dagger a_{k+q}$. Здесь a_k^\dagger и a_k —

операторы рождения и уничтожения (Ферми или Бозе). Исходными являются следующие уравнения движения:

$$\dot{P}_k = \frac{1}{i\hbar} [P_k, H]. \quad (225)$$

Обычно предполагается, что

$$[P_k, H_0] = \sum_l c_{kl} P_l, \quad (226)$$

где c_{kl} — некоторые коэффициенты (c -числа).

В соответствии с (214) имеем

$$\rho = Q^{-1} \exp \left(- \sum_k F_k(t) P_k + \sum_k \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} [\dot{F}_k(t+t_1) P_k(t_1) + F_k(t+t_1) \dot{P}_k(t_1)] \right). \quad (227)$$

При этом учитываем, что $\langle P_k \rangle = \langle P_k \rangle_q$. Обобщенные кинетические уравнения [353] для $\langle P_k \rangle$ запишутся в виде

$$\frac{d\langle P_k \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [P_k, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_l c_{kl} \langle P_l \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [P_k, V] \rangle. \quad (228)$$

Правая часть (228) содержит обобщенный *интеграл столкновений*, который можно записать с помощью разложения по степеням V в виде

$$\frac{d\langle P_k \rangle}{dt} = L_k^0 + L_k^1 + L_k^{21} + L_k^{22}, \quad (229)$$

где

$$L_k^0 = \frac{1}{i\hbar} \sum_l c_{kl} \langle P_l \rangle_q, \quad (230)$$

$$L_k^1 = \frac{1}{i\hbar} \langle [P_k, V] \rangle_q, \quad (231)$$

$$L_k^{21} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [V(t_1), [P_k, V]] \rangle_q, \quad (232)$$

$$L_k^{22} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \left\langle \left[V(t_1), i\hbar \sum_l P_l \frac{\partial L_k^1(\dots \langle P_l \rangle \dots)}{\partial \langle P_l \rangle} \right] \right\rangle_q. \quad (233)$$

Аналогичным образом можно найти члены высших порядков V^3 , V^4 и т. д.

7.2. Обобщенные кинетические уравнения для системы в термостате.

В работах [354–356] (см. также [7]) было дано обобщение уравнений (228) на случай системы, взаимодействующей с термостатом. Концепция термостата, или теплового резервуара, довольно непростая и имеет определенную специфику [357]. Стандартное определение термостата — система, которая эффективно имеет бесконечное число степеней свободы. Термостатом является тепловой резервуар, поддерживающий заданную температуру изучаемой системы. Следуя Н. Н. Боголюбову [358], мы будем считать термостат источником стохастизации малой подсистемы (которая в предельном случае может быть одной частицей). Примерами таких систем могут быть атомная или молекулярная система, взаимодействующая с электромагнитным полем, или система ядерных или электронных спинов, взаимодействующая с решеткой кристалла, и т. п. Будем описывать полную систему гамильтонианом

$$H = H_1 + H_2 + V, \quad (234)$$

где

$$H_1 = \sum_{\alpha} E_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}, \quad V = \sum_{\alpha, \beta} \Phi_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}, \quad \Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\beta\alpha}^{\dagger}. \quad (235)$$

Здесь H_1 — гамильтониан малой подсистемы; a_{α}^{\dagger} , a_{α} — операторы рождения и уничтожения квазичастиц в малой подсистеме с энергиями E_{α} ; V — оператор взаимодействия между малой подсистемой и термостатом; H_2 — гамильтониан термостата, который мы не выписываем явно. Величины $\Phi_{\alpha\beta}$ являются операторами, действующими на переменные термостата. Мы предполагаем, что состояние системы можно охарактеризовать набором операторов $\langle P_{\alpha\beta} \rangle = \langle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \rangle$, а состояние термостата — оператором $\langle H_2 \rangle$. Здесь $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение с НСО, который определяется следующим образом:

$$\rho_q(t) = \exp(-S(t, 0)), \quad S(t, 0) = \Omega(t) + \sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) + \beta H_2, \quad (236)$$

$$\Omega = \ln \text{Tr} \exp \left(- \sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) - \beta H_2 \right).$$

Здесь $F_{\alpha\beta}(t)$ — термодинамические параметры, сопряженные с $P_{\alpha\beta}$; β — обратная температура термостата. Все операторы рассматриваются в гейзенберговском представлении. Неравновесный статистический оператор запишем в виде

$$\overline{S(t, 0)} = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \left(\rho(t) = \exp(-\overline{S(t, 0)}), \right. \quad (237)$$

$$\left. \Omega(t + t_1) + \sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) + \beta H_2 \right).$$

Параметры $F_{\alpha\beta}(t)$ определяются из условия $\langle P_{\alpha\beta} \rangle = \langle P_{\alpha\beta} \rangle_q$. При выводе кинетических уравнений мы используем разложение по параметру малого взаимодействия V ; также предполагается, что справедливо равенство $\langle \Phi_{\alpha\beta} \rangle_q = 0$. Для дальнейшего удобно переписать ρ_q в виде

$$\rho_q = \rho_1 \rho_2 = Q_q^{-1} \exp(-L_0(t)), \quad (238)$$

где

$$\rho_1 = Q_1^{-1} \exp\left(-\sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t)\right), \quad Q_1 = \text{Tr} \exp\left(-\sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t)\right), \quad (239)$$

$$\rho_2 = Q_2^{-1} e^{-\beta H_2}, \quad Q_2 = \text{Tr} \exp(-\beta H_2), \quad (240)$$

$$Q_q = Q_1 Q_2, \quad L_0 = \sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) + \beta H_2. \quad (241)$$

Исходным является следующее соотношение:

$$\frac{d\langle P_{\alpha\beta} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [P_{\alpha\beta}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} (E_\beta - E_\alpha) \langle P_{\alpha\beta} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [P_{\alpha\beta}, V] \rangle. \quad (242)$$

Мы ограничиваемся членами второго порядка по V . Кинетические уравнения для системы в термостате для $\langle P_{\alpha\beta} \rangle$ имеют вид

$$\frac{d\langle P_{\alpha\beta} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (E_\beta - E_\alpha) \langle P_{\alpha\beta} \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [[P_{\alpha\beta}, V], V(t_1)] \rangle_q. \quad (243)$$

Эти уравнения обобщают результаты работы [353] для системы в термостате. Можно показать, что предположение о модельной форме гамильтониана (234) является несущественным. Для произвольных H_1 и V и некоторого набора переменных $\langle P_k \rangle$, которые удовлетворяют условию $[H_1, P_k] = \sum_l c_{kl} P_l$, можно построить квазиравновесный статистический оператор ρ_q в виде

$$\rho_q = Q_q^{-1} \exp\left(-\sum_k P_k F_k(t) - \beta H_2\right). \quad (244)$$

Здесь $F_k(t)$ — параметры, сопряженные с $\langle P_k \rangle$. Кинетические уравнения для $\langle P_k \rangle$ запишутся в виде

$$\frac{d\langle P_k \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \sum_l c_{kl} \langle P_l \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [[P_k, V], V(t_1)] \rangle_q. \quad (245)$$

7.3. Уравнение типа уравнения Шредингера для динамической системы в термостате. Рассмотрим теперь, следуя работам [7, 354–356], поведение малой динамической подсистемы с гамильтонианом H_1 , которая взаимодействует с термостатом с гамильтонианом H_2 . В качестве операторов, характеризующих состояние малой подсистемы, выберем операторы $a_\alpha^\dagger, a_\alpha$ и $n_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$. В этом случае квазиравновесный статистический оператор ρ_q принимает форму

$$\rho_q = \exp \left[\Omega - \sum_{\alpha} (f_{\alpha}(t) a_{\alpha} + f_{\alpha}^{\dagger}(t) a_{\alpha}^{\dagger} + F_{\alpha}(t) n_{\alpha}) - \beta H_2 \right] \equiv \exp(-S(t, 0)), \quad (246)$$

$$\Omega = \ln \text{Tr} \exp \left[- \sum_{\alpha} (f_{\alpha}(t) a_{\alpha} + f_{\alpha}^{\dagger}(t) a_{\alpha}^{\dagger} + F_{\alpha}(t) n_{\alpha}) - \beta H_2 \right].$$

Здесь $f_{\alpha}, f_{\alpha}^{\dagger}$ и F_{α} играют роль множителей Лагранжа. Они являются параметрами, сопряженными с $\langle a_{\alpha} \rangle_q, \langle a_{\alpha}^{\dagger} \rangle_q$ и $\langle n_{\alpha} \rangle_q$:

$$\langle a_{\alpha} \rangle_q = - \frac{\delta \Omega}{\delta f_{\alpha}(t)}, \quad \langle n_{\alpha} \rangle_q = - \frac{\delta \Omega}{\delta F_{\alpha}(t)}, \quad \frac{\delta S}{\delta \langle a_{\alpha} \rangle_q} = f_{\alpha}(t), \quad \frac{\delta S}{\delta \langle n_{\alpha} \rangle_q} = F_{\alpha}(t). \quad (247)$$

Величины $a_{\alpha}, a_{\alpha}^{\dagger}$ в статистическом операторе можно интерпретировать как источники *квантового шума* (см. работы [7, 356]). Квазиравновесный статистический оператор преобразуем к виду

$$\rho_q = \rho_1 \rho_2, \quad (248)$$

где

$$\rho_1 = \exp \left[\Omega_1 - \sum_{\alpha} (f_{\alpha}(t) a_{\alpha} + f_{\alpha}^{\dagger}(t) a_{\alpha}^{\dagger} + F_{\alpha}(t) n_{\alpha}) \right], \quad (249)$$

$$\Omega_1 = \ln \text{Tr} \exp \left[- \sum_{\alpha} (f_{\alpha}(t) a_{\alpha} + f_{\alpha}^{\dagger}(t) a_{\alpha}^{\dagger} + F_{\alpha}(t) n_{\alpha}) \right],$$

$$\rho_2 = \exp(\Omega_2 - \beta H_2), \quad \Omega_2 = \ln \text{Tr} \exp(-\beta H_2). \quad (250)$$

В результате для НСО ρ получим выражение (237). Предполагаем выполнение условий:

$$\langle a_{\alpha} \rangle_q = \langle a_{\alpha} \rangle, \quad \langle a_{\alpha}^{\dagger} \rangle_q = \langle a_{\alpha}^{\dagger} \rangle, \quad \langle n_{\alpha} \rangle_q = \langle n_{\alpha} \rangle. \quad (251)$$

Исходим из уравнений движения

$$i\hbar \frac{d\langle a_{\alpha} \rangle}{dt} = \langle [a_{\alpha}, H_1] \rangle + \langle [a_{\alpha}, V] \rangle, \quad (252)$$

$$i\hbar \frac{d\langle n_{\alpha} \rangle}{dt} = \langle [n_{\alpha}, H_1] \rangle + \langle [n_{\alpha}, V] \rangle. \quad (253)$$

Во втором порядке по V получаем

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [[a_\alpha, V], V(t_1)] \rangle_q, \quad (254)$$

$$i\hbar \frac{d\langle n_\alpha \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [[n_\alpha, V], V(t_1)] \rangle_q. \quad (255)$$

Здесь $V(t_1)$ обозначает оператор V в представлении взаимодействия. Разложение дает

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \left(\sum_{\beta\mu\nu} \langle \Phi_{\alpha\beta} \phi_{\mu\nu}(t_1) \rangle_q \langle a_\beta a_\mu^\dagger a_\nu \rangle_q - \langle \phi_{\mu\nu}(t_1) \Phi_{\alpha\beta} \rangle_q \langle a_\mu^\dagger a_\nu a_\beta \rangle_q \right), \quad (256)$$

где $\phi_{\mu\nu}(t_1) = \Phi_{\mu\nu}(t_1) \exp[(i/\hbar)(E_\mu - E_\nu)t_1]$. Или, в другой форме,

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\beta\mu} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle \Phi_{\alpha\mu} \phi_{\mu\beta}(t_1) \rangle_q \langle a_\beta \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\beta\mu\nu} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [\Phi_{\alpha\nu}, \phi_{\mu\nu}(t_1)] \rangle_q \langle a_\mu^\dagger a_\nu a_\beta \rangle_q. \quad (257)$$

В результате получаем:

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\beta\mu} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle \Phi_{\alpha\mu} \phi_{\mu\beta}(t_1) \rangle_q \langle a_\beta \rangle. \quad (258)$$

С помощью спектральных представлений для корреляционных функций запишем

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \langle a_\beta \rangle, \quad (259)$$

где $K_{\alpha\beta}$ определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle \Phi_{\beta\mu} \phi_{\mu\nu}(t_1) \rangle_q &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J_{\mu\nu, \beta\mu}(\omega)}{\hbar\omega - E_\mu - E_\nu + i\varepsilon} = K_{\beta\nu}. \end{aligned} \quad (260)$$

Таким образом, мы получили уравнение типа уравнения Шредингера для *средних амплитуд* $\langle a_\alpha \rangle$. Оно является в определенном смысле аналогом (или обобщением) уравнения Шредингера для случая движения частицы в среде. Рассмотрим эту аналогию более подробно. Для этого запишем *аналог волновой функции* в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \chi_{\alpha}(\mathbf{r}) \langle a_{\alpha} \rangle. \quad (261)$$

Здесь $\{\chi_{\alpha}(\mathbf{r})\}$ — полный ортонормированный набор одночастичных волновых функций оператора $(-\hbar^2/2m)\nabla^2 + v(\mathbf{r})$; $v(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right) \chi_{\alpha}(\mathbf{r}) = E_{\alpha} \chi_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (262)$$

Таким образом, величина $\psi(\mathbf{r})$ играет роль *волновой функции* для случая движения частицы в среде. При этом уравнение (259) преобразуется к виду

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}) + \int K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (263)$$

Ядро $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ интегрального уравнения (263) имеет вид

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{\alpha\beta} K_{\alpha\beta} \chi_{\alpha}(\mathbf{r}) \chi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}') = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha, \beta, \mu, \nu} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle \Phi_{\alpha\mu} \phi_{\mu\beta}(t_1) \rangle_q \chi_{\alpha}(\mathbf{r}) \chi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (264)$$

Видно, что уравнение (263) действительно можно назвать уравнением типа уравнения Шредингера для динамической системы в термостате. Интересно отметить, что очень похожие уравнения типа уравнения Шредингера с не-локальным взаимодействием применялись в теории столкновений [359] для описания рассеяния частицы на совокупности многих рассеивающих центров. Для того чтобы показать яснее некоторые особенности уравнения (263), рассмотрим оператор трансляции $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{p}/\hbar)$, где $\mathbf{q} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$; $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_r$.

Тогда уравнение (263) запишется в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{p}} D(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \psi(\mathbf{r}), \quad (265)$$

где

$$D(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d^3q K(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{q}) \exp\left(\frac{i\mathbf{q}\mathbf{p}}{\hbar}\right). \quad (266)$$

Разумно предположить, что волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ меняется не очень значительно на характерной корреляционной длине ядра $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Тогда, используя разложение в ряд $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar)$, получим в нулевом порядке

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(\mathbf{r}) + \operatorname{Re} U(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) + i \operatorname{Im} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad (267)$$

где

$$U(\mathbf{r}) = \operatorname{Re} U(\mathbf{r}) + i \operatorname{Im} U(\mathbf{r}) = \int d^3q K(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{q}). \quad (268)$$

Уравнение (267) имеет в точности функциональную форму уравнения Шредингера с комплексным потенциалом, известным в теории столкновений [359]. Заметим, что введение величины $\psi(\mathbf{r})$ не означает, что состояние малой динамической подсистемы становится чистым состоянием. Оно остается смешанным, так как описывается статистическим оператором; при этом динамика системы описывается системой связанных уравнений эволюции для величин $f_\alpha, f_\alpha^\dagger$ и F_α . Отметим, что попытки вывода уравнения типа уравнения Шредингера для частицы в среде предпринимались неоднократно [360–362]. Такое уравнение пытался получить Корринга [360] в виде уравнения эволюции с неэрмитовым гамильтонианом. Однако его уравнение (см. (29) в [360])

$$i \frac{\partial W'}{\partial t} = \left(H'(t) + h'(t) + \frac{i}{2\theta} \frac{dh'}{dt} + \dots \right) W'(t), \quad (269)$$

где $W'(t)$ является статистической матрицей плотности для исходной системы, скорее является модифицированным уравнением Блоха. Попытка вывести уравнение типа уравнения Шредингера для броуновской частицы, взаимодействующей с тепловым окружением, была предпринята в работе [361]. Полученное уравнение эволюции имело вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi + V_R\psi + \left[\frac{\hbar f}{2im} \ln \left(\frac{\psi}{\psi^*} \right) + W(t) \right] \psi(\mathbf{r}, t), \quad (270)$$

где

$$W(t) = - \left(\frac{\hbar f}{2im} \right) \int \psi^* \ln \left(\frac{\psi}{\psi^*} \right) \psi dr. \quad (271)$$

Здесь f — коэффициент трения; V_R — случайный потенциал; $V_R(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{r}\mathbf{F}_R(t)$ и $\mathbf{F}_R(t)$ — случайная векторная функция времени. После исключения $W(t)$ с помощью преобразования

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp[i\theta(t)]\phi(\mathbf{r}, t), \quad (272)$$

где

$$\theta(t) = -\hbar^{-1} \exp \left(-\frac{tf}{m} \right) \int_{0^+}^t \exp \left(\frac{sf}{m} \right) W(s) ds,$$

уравнение для $\phi(\mathbf{r}, t)$ примет форму

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t) + V_R(\mathbf{r}, t)\phi(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar f}{2im} \phi(\mathbf{r}, t) \ln \left[\frac{\phi(\mathbf{r}, t)}{\phi^*(\mathbf{r}, t)} \right]. \quad (273)$$

Ясно видно, что уравнение типа уравнения Шредингера с затуханием (263) наиболее точно описывает динамическое поведение частицы в среде с учетом диссипации. Это обуславливает многочисленные применения данного уравнения к задачам физики, физической химии, биофизики и т. п. [363–371]. Подробное обсуждение различных аспектов диссипативного поведения и стохастических процессов в сложных системах дано в обзорах [7, 372–375].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе была показана определяющая роль *корреляционных эффектов* при последовательном микроскопическом описании магнитных, электрических и сверхпроводящих свойств сложных веществ. Была подчеркнута эффективность приближения сильно связанных электронов и метода модельных гамильтонианов для описания этих веществ. Методы квантовой статистической механики, сформулированные в работах Н. Н. Боголюбова, позволяют во многих случаях разработать эффективные подходы к решению сложных проблем микроскопической теории корреляционных эффектов, особенно в случае сильной электронной корреляции. Метод двухвременных температурных функций Грина дает возможность эффективно исследовать квазичастичную динамику основных модельных гамильтонианов квантовой теории твердого тела и квантовой теории магнетизма. Метод квазисредних позволяет более глубоко взглянуть на проблемы спонтанного нарушения симметрии и в целом симметрии и диссимметрии в физике конденсированных сред. Дальнейшее развитие теории многочастичных эффектов и изучение более реалистических моделей позволит составить более точное представление об эффективных взаимодействиях в системе, которые определяют те или иные эффекты, обуславливающие особенности электронных состояний, а следовательно, и физические свойства реальных веществ. Методы, развитые Н. Н. Боголюбовым, составляют и будут составлять важнейший инструментарий и идейную основу этого развития.

Автор с благодарностью вспоминает обсуждение затронутых здесь вопросов с Н. Н. Боголюбовым (21.08.1909–13.02.1992) и Д. Н. Зубаревым (30.11.1917–16.07.1992). Выражаю признательность профессору Н. Н. Боголюбову (мл.) за ценные дискуссии и указание на работу [285].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гиббс Дж. В. Основные принципы статистической механики / Пер. с англ. К. В. Никольского. М.; Л.: ОГИЗ, 1946 [*Gibbs J. W. Elementary Principles in Statistical Mechanics Developed with Especial Reference to the Rational Foundations of Thermodynamics. New Heaven: Yale Univ. Press, 1902*].
2. Франкфурт У. И., Френк А. М. Джозайя Виллард Гиббс. М.: Наука, 1964.
3. Боголюбов Н. Н. Собр. науч. тр.: В 12 т. М.: Наука, 2005–2009.
4. Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.) Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984.
5. Боголюбов А. Н. Н. Н. Боголюбов. Жизнь. Творчество. Дубна: ОИЯИ, 1996.
6. Боголюбов Н. Н. (мл.), Санкович Д. П. Н. Н. Боголюбов и статистическая механика // УМН. 1994. Т. 49. С. 21.
7. Kuzemsky A. L. Theory of Transport Processes and the Method of the Nonequilibrium Statistical Operator // Intern. J. Mod. Phys. B. 2007. V. 21. P. 2821–2942; cond-mat/0707.0753.
8. van Voeyen R. W. et al. Practical Means for the Study of Electron Correlation in Atoms // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 223202.
9. Hummel R. E. Understanding Materials Science: History, Properties, Applications. Berlin: Springer, 2005.
10. O'Handley R. C. Modern Magnetic Materials: Principles and Applications. N. Y.: Wiley-Intersci., 1999.
11. Nanostructured Magnetic Materials and Their Applications / Eds. D. Shi et al. Berlin: Springer, 2001.
12. Magnetism and Structure in Functional Materials / Eds. A. Planes, L. Manosa, A. Saxena. Berlin: Springer, 2006.
13. Poole C. P. et al. Superconductivity. 3rd ed. N. Y.: Acad. Press, 2007.
14. Fredriksson H., Akerlind U. Physics of Functional Materials. N. Y.: John Wiley and Sons, 2008.
15. Stefanita C. G. From Bulk to Nano: The Many Sides of Magnetism. Springer Ser. in Materials Sci. V. 117. Berlin: Springer, 2008.
16. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975.
17. Маттис Д. Теория магнетизма. М.: Мир, 1967.
18. Куземский А. Л. Рассеяние нейтронов и магнитные свойства переходных металлов и сплавов // ЭЧАЯ. 1981. Т. 12. С. 366–423 [English Transl.: Sov. J. Part. Nucl. 1981. V. 12. P. 146].
19. Kuzemsky A. L. Fundamental Principles of the Physics of Magnetism and the Problem of Itinerant and Localized Electronic States. JINR Commun. E17-2000-32. Dubna, 2000.

20. *Kuzemsky A. L.* Irreducible Green Functions Method and Many-Particle Interacting Systems on a Lattice // *Rivista Nuovo Cim.* 2002. V. 25. P. 1–91; cond-mat/0208219.
21. *Kuzemsky A. L.* Correlation Effects in High Temperature Superconductors and Heavy Fermion Compounds // *Superconductivity and Strongly Correlated Electron Systems* / Eds.: C. Noce, A. Romano, G. Scarpetta. Singapore, 1994. P. 346–376.
22. *Куземский А. Л.* Самосогласованная теория электронной корреляции в модели Хаббарда // *ТМФ.* 1978. Т. 36. С. 208–223 [English Transl.: *Theor. Math. Phys.* 1979. V. 36. P. 692].
23. *Куземский А. Л.* Метод неприводимых функций Грина в теории конденсированных сред // *Докл. АН СССР.* 1989. Т. 309. С. 323–326 [English Transl.: *Sov. Phys. Dokl.* 1989. V. 34. P. 974].
24. *Kuzemsky A. L.* Generalized Mean Fields and Quasiparticle Interactions in the Hubbard Model // *Nuovo Cim.* 1994. V. 109B. P. 829–854.
25. *Czychoł G., Kuzemsky A. L., Wernbter S.* New Interpolative Treatment of the Single-Impurity Anderson Model // *Europhys. Lett.* 1996. V. 34. P. 133–138.
26. *Kuzemsky A. L.* Quasiparticle Many-Body Dynamics of the Anderson Model // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 1996. V. 10. P. 1895–1912.
27. *Kuzemsky A. L.* Role of Correlation and Exchange for Quasiparticle Spectra of Magnetic and Diluted Magnetic Semiconductors // *Physica B.* 2005. V. 355. P. 318–340; cond-mat/0403266.
28. *Conceptual Foundations of Materials: A Standard Model for Ground- and Excited-State Properties* / Eds. S. G. Louie, M. L. Cohen. Amsterdam: Elsevier, 2006.
29. *Livingston J. D.* *Driving Force: The Natural Magic of Magnets.* Cambridge, Mass.: Harvard Univ. Press, 1996.
30. *Вайскопф В.* *Наука и удивительное.* М.: Наука, 1965.
31. *Гильберт В.* *О магните, магнитных телах и о большом магните — Земле.* М.: Изд-во АН СССР, 1956. (Классики науки).
32. *Бочкарев Н. Г.* *Магнитные поля в космосе.* М.: Наука, 1985.
33. *Campbell W. H.* *Earth Magnetism.* N. Y.: Acad. Press, 2001.
34. *Zuber M. T.* Model for Magnetic Mystery // *Nature.* 2003. V. 421. P. 119.
35. *Вонсовский С. В.* *Магнетизм.* М.: Наука, 1971.
36. *Weiss P.* L'hypothese du champ moleculaire et la propriete ferromagnetique // *J. de Phys. Theor. et Appl.* 4e ser. 1907. V. 6. P. 661.
37. *Смарт Дж.* *Эффективное поле в теории магнетизма.* М.: Мир, 1968.
38. *Зубарев Д. Н.* *Неравновесная статистическая термодинамика.* М.: Наука, 1971.
39. *Toda M., Kubo R., Saito N.* *Statistical Physics. V. 1. Equilibrium Statistical Mechanics.* Berlin: Springer, 1992.
40. *Kubo R., Toda M., Hashitsume N.* *Statistical Physics. V. 2. Nonequilibrium Statistical Mechanics.* Berlin: Springer, 1991.

41. Минлос Р. А. Введение в математическую статистическую физику. М.: МЦНМО, 2002.
42. Grout P. J., March N. H. Internal Energy versus Moment for Ferromagnets and Pyroelectrics // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. P. 4027.
43. March N. H., Nip A. M. L., Tuszyński J. A. Free Energy in Relation to Order Parameter in Magnets and Pyroelectrics // Intern. J. Quant. Chem. 1996. V. 30. P. 1549.
44. Misra A. et al. Magnetically Ordered Materials: Relation between Internal Energy, Magnetization and Applied Field // Phys. Lett. A. 2004. V. 329. P. 396.
45. Ayuela A., March N. H. Spontaneous Magnetization Related to Internal Energy in an Assembly with Long-Range Interaction: Predicted Universal Features Fingerprints in Experimental Data from Fe and Ni // Phys. Lett. A. 2008. V. 372. P. 5617.
46. Domb C. The Critical Point. London: Taylor and Francis Ltd., 1996.
47. Weiss P., Foex G. Le Magnetisme. Paris: Colin, 1926.
48. Wlodarski Z., Wlodarska J. Analytical Approximation of the Dependence of Magnetic Material Properties on Temperature // Intern. J. for Comp. and Math. in Electrical and Electronic Engin. 1998. V. 17. P. 408.
49. Kuzmin M. D., Tishin A. M. Temperature Dependence of the Spontaneous Magnetization of Ferromagnetic Insulators: Does It Obey the $3/5 - 5/2 - \beta$ Law? // Phys. Lett. A. 2005. V. 341. P. 240.
50. Wlodarski Z. Analytical Description of Magnetization Curves // Physica B. 2006. V. 373. P. 323.
51. Дорфман Я. Г. Магнитные свойства и строение вещества. М.; Л.: Гос. изд-во техн.-геогр. лит., 1955.
52. Weber W., Riesen S., Siegmann H. C. Magnetization Precession by Hot Spin Injection // Science. 2001. V. 291. P. 1015.
53. Albert C. et al. Magnetism and the Weiss Exchange Field — A Theoretical Analysis Motivated by Recent Experiments // J. Stat. Phys. 2006. V. 125. P. 77.
54. Неель Л. Магнетизм и локальные молекулярные поля // УФН. 1972. Т. 107. С. 185.
55. White R. M. Quantum Theory of Magnetism. 3rd ed. Berlin: Springer, 2007.
56. Stohr J., Siegmann H. C. Magnetism. From Fundamentals to Nanoscale Dynamics. Berlin: Springer, 2006.
57. Введенский Б. А., Ландсберг Г. С. Современное учение о магнетизме. М.; Л.: Госиздат, 1929. С. V.
58. Stoner E. C. Magnetism and Atomic Structure. N. Y.: Dutton, 1926.
59. Van Vleck J. H. The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities. Oxford: Clarendon Press, 1932.
60. Блох Ф. Молекулярная теория магнетизма. Киев: ОНТИ, 1934.
61. Yosida K. Theory of Magnetism. Berlin: Springer, 1996.

62. *Herring C.* Exchange Interactions among Itinerant Electrons. N. Y.: Acad. Press, 1966.
63. *Zeiger H. J., Pratt G. W.* Magnetic Interactions in Solids. Oxford: Clarendon Press, 1973.
64. *Barbara B., Gignoux D., Vettier C.* Lectures on Modern Magnetism. Berlin: Springer, 1988.
65. *Caspers W. J.* Spin Systems. Singapore: World Sci., 1989.
66. *Aharoni A.* Introduction to the Theory of Ferromagnetism. Oxford: Clarendon Press, 1996.
67. *Chikazumi S.* Physics of Ferromagnetism. 2nd ed. Oxford: Clarendon Press, 1997.
68. *Stevens K. W. H.* Magnetic Ions in Crystals. Princeton: Princeton Univ. Press, 1997.
69. *de Jongh L. J., Miedema A. R.* Experiments on Simple Magnetic Model Systems // *Adv. Phys.* 2001. V. 50. P. 947.
70. Magnetism. I. Fundamentals / Eds. E. du Tremolet de Lacheisserie, D. Gignoux, M. Schlenker. Berlin: Springer, 2002.
71. Magnetism. II. Materials and Applications / Eds. E. du Tremolet de Lacheisserie, D. Gignoux, M. Schlenker. Berlin: Springer, 2005.
72. *Buschow K. H. J., De Boer F. R.* Physics of Magnetism and Magnetic Materials. N. Y.; Boston: Kluwer Press, 2003.
73. *Spaldin N.* Magnetic Materials: Fundamentals and Device Applications. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2003.
74. Magnetic Heterostructures. Advances and Perspectives in Spinstructures and Spin-transport / Eds. H. Zabel, S. D. Bader. Berlin: Springer, 2007.
75. Modern Techniques for Characterizing Magnetic Materials / Ed. Yimei Zhu. N. Y.; Boston: Kluwer Press, 2005.
76. *Marshall W., Lovesey S.* Theory of Thermal Neutron Scattering. Oxford: Clarendon Press, 1971.
77. Neutron Scattering from Magnetic Materials / Ed. T. Chatterji. Amsterdam: Elsevier Sci., 2006.
78. Magneto-Optics / Eds. S. Sugano, N. Kojima. Berlin: Springer, 2000.
79. *Lander G. H.* Studies of Magnetism with Synchrotron X-rays // *J. Alloys and Compounds.* 1997. V. 250. P. 544.
80. Magnetism and Synchrotron Radiation / Eds. E. Beaurepaire et al. Berlin: Springer, 2001.
81. Magnetism: A Synchrotron Radiation Approach / Eds. E. Beaurepaire et al. Berlin: Springer, 2006.
82. *Фетисов Г. В.* Синхротронное излучение. Методы исследования структуры вещества. М.: Физматлит, 2007.

83. Fifty Years of Neutron Diffraction / Ed. G. E. Bacon. Bristol: Adam Hilger, 1986.
84. *Иосида К.* Развитие исследований по магнетизму // Перспективы квантовой физики: Пер. с яп. Киев, 1982. С. 101.
85. *Ван Флек Дж.* Квантовая механика — ключ к пониманию магнетизма // УФН. 1979. Т. 127. С. 3.
86. *Yamanaka S. et al.* Chemical Bonding, Less Screening, and Hund's Rule Revisited // Intern. J. Quant. Chem. 2005. V. 105. P. 687.
87. *Mielke A.* Ferromagnetism in the Hubbard Model and Hund's Rule // Phys. Lett. A. 1993. V. 174. P. 443.
88. *Frohlich J., Ueltschi D.* Hund's Rule and Metallic Ferromagnetism // J. Stat. Phys. 2005. V. 118. P. 973.
89. *Massimi M.* Pauli's Exclusion Principle: The Origin and Validation of a Scientific Principle. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2005.
90. *Каллуэй Дж.* Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969.
91. *Harrison W. A.* Elementary Electronic Structure. Singapore: World Sci., 1999.
92. *Martin R. M.* Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004.
93. *Peierls R.* Model-Making in Physics // Contemp. Phys. 1980. V. 21. P. 3.
94. *Brush S. G.* History of the Lenz–Ising Model // Rev. Mod. Phys. 1967. V. 39. P. 883.
95. *Kobe S.* Ernst Ising — Physicist and Teacher // J. Stat. Phys. 1997. V. 88. P. 991.
96. The Collected Works of Lars Onsager / Eds. P. C. Hemmer et al. Singapore: World Sci., 1996.
97. *Bennetin G. et al.* On the Onsager–Yang-Value of the Spontaneous Magnetization // Commun. Math. Phys. 1973. V. 30. P. 45.
98. *Heisenberg W.* Zur Theorie des Ferromagnetismus // Z. Phys. 1928. V. 49. P. 619.
99. *Dirac P.* Quantum Mechanics of Many-Electron Systems // Proc. Roy. Soc. A. 1929. V. 123. P. 714.
100. *Van Vleck J. H.* Nonorthogonality and Ferromagnetism // Phys. Rev. 1936. V. 49. P. 232.
101. *Kittel C.* Ferromagnetism // Suppl. Nuovo Cim. 1957. V. 6. P. 897.
102. *Van Vleck J. H.* Models of Exchange Coupling in Ferromagnetic Media // Rev. Mod. Phys. 1953. V. 25. P. 220.
103. *Arai T.* Exchange Interaction and Heisenberg's Spin Hamiltonian // Phys. Rev. 1962. V. 126. P. 471.
104. *Herring C.* On the Possibility of Saturated Ferromagnetism // Phys. Rev. B. 1975. V. 11. P. 2056.
105. *Carson C.* The Peculiar Notion of Exchange Forces. I. Origins in Quantum Mechanics 1926–1928 // Studies in History and Philos. of Mod. Phys. 1996. V. 27. P. 23.

106. *Van Vleck J. H.* On the Theory of Antiferromagnetism // *J. Chem. Phys.* 1941. V. 9. P. 85.
107. *Gorter C. J.* Antiferromagnetism // *Suppl. Nuovo Cim.* 1957. V. 6. P. 923.
108. *O'Sullivan W. J., Robinson W. A., Simmons W. W.* Sublattice Switching in Antiferromagnets // *Phys. Rev.* 1961. V. 124. P. 1317.
109. Антиферромагнетизм и ферриты / Ред. Я. Г. Дорфман. М.: Изд-во АН СССР, 1962.
110. *Белов К. П. и др.* Редкоземельные ферро- и антиферромагнетики. М.: Наука, 1965.
111. *Смоленский Г. А. и др.* Физика магнитных диэлектриков. Л.: Наука, 1974.
112. *Смоленский Г. А., Леманов В. В.* Ферриты и их техническое применение. Л.: Наука, 1975.
113. *Звездин А. К. и др.* Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. М.: Наука, 1985.
114. *Никитин С. А.* Магнитные свойства редкоземельных металлов и сплавов. М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1989.
115. *Туров Е. А. и др.* Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. М.: Физматлит, 2001.
116. *Боровик Е. С., Еременко В. В., Мильнер А. С.* Лекции по магнетизму. М.: Физматлит, 2005.
117. *Neel L.* Proprietes Magnetiques des Ferrites. Ferrimagnetisme et Antiferromagnetisme // *Ann. Phys.* 1948. V. 3. P. 137.
118. *Wolf W. P.* Ferrimagnetism // *Rep. Progr. Phys.* 1961. V. 24. P. 212.
119. *Quedec P.* Itineraire de Louis Neel des Aimants aux Grenats Ferrimagnetiques // *Ann. Sci.* 1990. V. 47. P. 261.
120. *Selected Works of Louis Neel* / Ed. N. Kurti. London: Routledge, 1988.
121. *Neel L.* Un Siecle de Physique. Paris: Edit. Odile Jacob, 1991.
122. *Prevot M., Dunlop D.* Louis Neel: 40 Years of Magnetism // *Physics of the Earth and Planetary Interiors.* 2001. V. 126, Iss. 1–2. P. 3.
123. *Anderson P. W.* Ordering and Antiferromagnetism in Ferrites // *Phys. Rev.* 1956. V. 102. P. 1008.
124. *Morrish A. H.* Canted Antiferromagnetism: Hematite. Singapore: World Sci., 1994.
125. *Neel L.* // *Ann. Phys.* 1949. V. 4. P. 249.
126. *Aharoni A., Frei E. H., Schierer M.* Curie Point and Origin of Weak Ferromagnetism in Hematite // *Phys. Rev.* 1962. V. 127. P. 439.
127. *Moriya T.* New Mechanism of Anisotropic Superexchange Interaction // *Phys. Rev. Lett.* 1960. V. 4. P. 228.

128. *Moriya T.* Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism // *Phys. Rev.* 1960. V. 117. P. 635.
129. *Lin S. T.* Magnetic Properties of Hematite Single Crystals. I. Magnetization Isotherms, Antiferromagnetic Susceptibility, and Weak Ferromagnetism of a Natural Crystal // *Phys. Rev.* 1959. V. 116. P. 1447.
130. *Flanders P. J., Remeika J. P.* The Magnetic Properties of Hematite Single Crystals // *Philos. Mag.* 1965. V. 11. P. 1271.
131. *Dunlop D. J.* Hematite: Intrinsic and Defect Ferromagnetism // *Science.* 1970. V. 169. P. 858.
132. *Куземский А. Л., Ткаченко Е. А.* Рассеяние медленных нейтронов на гематите в сильных магнитных полях // *ФТТ.* 1974. Т. 16. С. 3082–3088.
133. *Suber L. et al.* Structural and Magnetic Properties of $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$ Nanoparticles // *Appl. Organometal. Chem.* 1998. V. 12. P. 347.
134. *Bodker F., Morup S.* Size Dependence of the Properties of Hematite Nanoparticles // *Europhys. Lett.* 2000. V. 52. P. 217.
135. *Hansen M. F., Koch C. B., Morup S.* Magnetic Dynamics of Weakly and Strongly Interacting Hematite Nanoparticles // *Phys. Rev. B.* 2000. V. 62. P. 1124.
136. *Raming T. P. et al.* The Synthesis and Magnetic Properties of Nanosized Hematite $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$ Particles // *J. of Colloid and Interface Sci.* 2002. V. 249. P. 346.
137. *Hurd C. M.* Varieties of Magnetic Order in Solids // *Contemp. Phys.* 1982. V. 23. P. 469.
138. *Нагаев Э. Л.* Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука, 1988.
139. *Максимов Л. А., Куземский А. Л.* К теории ферромагнитного кристалла с двумя спинами в узле // *ФММ.* 1971. Т. 31. С. 5–12 [*Phys. of Metals and Metallogr.* 1971. V. 31. P. 1–8].
140. *Lulek T.* The System of Two Spins as a Simplified Model for the Heisenberg Ferromagnet // *Acta Magnetica.* 1984. V. 1. P. 85.
141. *Piasecki R.* Anisotropic Ferromagnet with Two Spins per Site // *phys. stat. sol. b.* 1981. V. 103. P. 547.
142. *Berger L. et al.* Magnetic Susceptibility of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ at Low Temperature // *Phys. Rev.* 1963. V. 132. P. 1057.
143. *Tachiki M., Yamada T.* Spin Ordering in a Spin-Pair System // *J. Phys. Soc. Japan.* 1970. V. 28. P. 1413.
144. *Furrer A., Gudel H. U.* Interference Effects in Neutron Scattering from Magnetic Clusters // *Phys. Rev. Lett.* 1977. V. 39. P. 657.
145. *Gudel H. U., Furrer A., Kjems J. K.* Neutron Scattering in Dimers // *JMMM.* 1986. V. 54–57. P. 1453.
146. *Strieb B., Callen H. B., Horwitz G.* Cluster Expansion for the Heisenberg Ferromagnet // *Phys. Rev.* 1963. V. 130. P. 1798.

147. *Нагаев Э.Л.* Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979.
148. *Пайерлс Р.* Квантовая теория твердых тел. М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
149. *Peierls R.* Bird of Passage. Recollections of a Physicist. Princeton: Princeton Univ. Press, 1985.
150. *Займан Дж.* Электроны и фононы М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
151. *Mizutani U.* Introduction to the Electron Theory of Metals. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2001.
152. *Куземский А.Л.* Работы Д.И. Блохинцева и развитие квантовой физики // ЭЧАЯ. 2008. Т. 39. С. 5–81 [English Transl.: Phys. Part. Nucl. 2008. V. 39. P. 137–172].
153. *Van Vleck J.H.* Magnetic Properties of Metals // Suppl. Nuovo Cim. 1957. V. 6. P. 857.
154. *Shimizu M.* Itinerant Electron Magnetism // Rep. Prog. Phys. 1981. V. 44. P. 329.
155. *Мория Т.* Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами: Пер. с англ. М.: Мир, 1988.
156. *Kubler J.* Theory of Itinerant Electron Magnetism. Oxford: Clarendon Press, 2000.
157. *Mizia J., Gorski G.* Models of Itinerant Ordering in Crystals. Amsterdam: Elsevier, 2007.
158. *Mott N. F.* Electrons in Transition Metals // Adv. Phys. 1964. V. 13. P. 325.
159. *Raimis S.* Many-Electron Theory. Amsterdam: North-Holland, 1972.
160. *Friedel J.* On the Band Structure of Transition Metals // J. Phys. F: Metal Phys. 1973. V. 3. P. 785.
161. *Goringe C. M., Bowler D. R., Hernandez E.* Tight-Binding Modelling of Materials // Rep. Prog. Phys. 1997. V. 60. P. 1447.
162. *Anderson P. W.* Localized Magnetic States in Metals // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41.
163. *Андерсон Ф.* Локальные моменты и локализованные состояния // УФН. 1979. Т. 127. С. 19.
164. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands // Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238.
165. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands. II. The Degenerate Band Case // Proc. Roy. Soc. A. 1964. V. 277. P. 237.
166. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution // Ibid. V. 281. P. 401.
167. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands. IV. The Atomic Representation // Proc. Roy. Soc. A. 1965. V. 285. P. 542.
168. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands. V. A Perturbation Expansion about the Atomic Limit // Proc. Roy. Soc. A. 1966. V. 296. P. 82.

169. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands. VI. The Connection with Many-Body Perturbation Theory // *Ibid.* P. 100.
170. *Lieb E. H.* Models // *Proc. of the 14th Conf. on Chemistry.* Brussels, 1969. P. 45.
171. *Kanamori J.* Electron Correlations and Ferromagnetism of Transition Metals // *Prog. Theor. Phys.* 1963. V. 30. P. 275.
172. *Lieb E. H.* The Hubbard Model: Some Rigorous Results and Open Problems. *cond-mat/9311032.* 1993.
173. *Mielke A., Tasaki H.* Ferromagnetism in the Hubbard Model // *Commun. Math. Phys.* 1993. V. 158. P. 341.
174. *Tasaki H.* The Hubbard Model — An Introduction and Selected Rigorous Results // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1998. V. 10. P. 4353.
175. *Mielke A., Tasaki H.* Ferromagnetism in the Hubbard Model: A Constructive Approach // *Commun. Math. Phys.* 2003. V. 242. P. 445.
176. *Lieb E. H., Loss M., McCann R. J.* Uniform Density Theorem for the Hubbard Model // *J. Math. Phys.* 1993. V. 34. P. 891.
177. *Yanagisawa T., Shimo Y.* Exact Results in Strongly Correlated Electrons — Spin-Reflection Positivity and the Perron-Frobenius Theorem // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 1996. V. 10. P. 3383.
178. *Stein J.* Flow Equations and the Strong-Coupling Expansion for the Hubbard Model // *J. Stat. Phys.* 1997. V. 88. P. 487.
179. *Канамори Д.* О некоторых аспектах физики твердого тела // *Перспективы квантовой физики: Пер. с яп.* Киев, 1982. С. 85.
180. *Fröhlich H.* Superconductivity and the Many Body Problem // *Perspectives in Mod. Phys.* / Ed. R. E. Marshak. N. Y., 1966. P. 539.
181. *Mitra T. K.* Electron-Phonon Interaction in the Modified Tight-Binding Approximation // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1969. V. 2. P. 52.
182. *Barisic S., Labbe J., Friedel J.* Tight Binding and Transition-Metal Superconductivity // *Phys. Rev. Lett.* 1970. V. 25. P. 919.
183. *Kuzemsky A. L., Holas A., Plakida N. M.* Self-Consistent Theory of an Electron-Phonon Interaction in Transition Metals and Their Compounds // *Physica B.* 1983. V. 122. P. 168–182.
184. *Kuzemsky A. L., Zhernov A. P.* Modified Tight-Binding Approximation and Electron-Phonon Spectral Function of Transition Metals // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 1990. V. 4. P. 1395–1407.
185. *Christoph V., Kuzemsky A. L.* Electrical Conductivity of a Metallic System with a Non-spherical Fermi Surface // *phys. stat. sol. b.* 1982. V. 111. P. K1–K6.
186. *Christoph V., Kuzemsky A. L.* The Influence of the Electron-Phonon Interaction on the Electroconductivity of Disordered Metallic Alloys // *phys. stat. sol. b.* 1983. V. 120. P. K219–K224.

187. *Wysokinski K. I., Kuzemsky A. L.* Electron–Phonon Interaction in Disordered Transition Metal Alloys // *phys. stat. sol. b.* 1982. V. 113. P. 409–420.
188. *Wysokinski K. I., Kuzemsky A. L.* The Theory for Strong-Coupling Superconductivity in Disordered Transition Metal Alloys // *J. Low Temp. Phys.* 1983. V. 52. P. 81–98.
189. *Kuzemsky A. L.* Quantum Protectorate and Microscopic Models of Magnetism // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 2002. V. 16. P. 803–823; cond-mat/0208222.
190. *Fischer K. H.* Theory of Dilute Magnetic Alloys // *phys. stat. sol. b.* 1971. V. 46. P. 11.
191. *Fischer K. H.* Dilute Magnetic Alloys with Transition Metals as Host // *Phys. Rep.* 1978. V. 47. P. 225.
192. *Hewson A. C.* Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1993.
193. *Kuzemsky A. L.* Spectral Properties of the Generalized Spin-Fermion Models // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 1999. V. 13. P. 2573–2605; cond-mat/0208277.
194. *Tsvelick A. M., Wiegmann P.* Exact Results in the Theory of Magnetic Alloys // *Adv. Phys.* 1983. V. 32. P. 453.
195. *Czycholl G.* Approximate Treatments of Intermediate Valence and Heavy Fermion Model Systems // *Phys. Rep.* 1986. V. 143. P. 277.
196. *Falicov L. M., Kimball J. C.* Simple Model for Semiconductor-Metal Transitions: SmB_6 and Transition-Metal Oxides // *Phys. Rev. Lett.* 1969. V. 22. P. 997.
197. *Kimball J. C.* Magnetic Metal–Nonmetal Transitions: A Simple Model // *Phys. Rev. Lett.* 1972. V. 29. P. 127.
198. *Kennedy T.* Some Rigorous Results on the Ground States of the Falicov–Kimball Model // *Rev. Math. Phys.* 1994. V. 6. P. 901.
199. *Lebovitz J. L., Macris N.* Long Range Order in the Falicov–Kimball Model: Extension of Kennedy–Lieb Theorem // *Rev. Math. Phys.* 1994. V. 6. P. 927.
200. *Gruber C., Macris N.* The Falicov–Kimball Model: A Review of Exact Results and Extensions // *Helv. Phys. Acta.* 1996. V. 69. P. 850.
201. *Gruber C. et al.* Ground States and Flux Configurations of the Two-Dimensional Falicov–Kimball Model // *J. Stat. Phys.* 1997. V. 86. P. 57.
202. *Freericks J. K., Zlatic V.* Exact Dynamical Mean-Field Theory of the Falicov–Kimball Model // *Rev. Mod. Phys.* 2003. V. 75. P. 1333.
203. *Gruber C., Ueltschi D.* The Falicov–Kimball Model. math-ph/0502041. 2005.
204. *Batista C. D.* Electronic Ferroelectricity in the Falicov–Kimball Model // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. P. 166403.
205. *Kuzemsky A. L.* Theory of Transverse Neutron Inelastic Scattering in the Transition Metals // *Phys. Condens. Matter.* 1974. V. 18. P. 179–187.
206. *Куземский А. Л.* К теории корреляции d -электронов в переходных металлах // *Acta Phys. Polon. A.* 1976. V. 49. P. 169–180.

-
207. *Marvakov D., Vlahov J., Kuzemsky A. L.* Electronic Spectrum of a Magnetic Semiconductor in the s - f Exchange Model Approximation // *Bulg. J. Phys.* 1983. V. 10. P. 289–296.
208. *Marvakov D., Vlahov J., Kuzemsky A. L.* The Self-consistent Theory of Elementary Excitations in System with Many-Branch Quasiparticle Spectra (Ferromagnetic Semiconductors) // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1985. V. 18. P. 2871–2885.
209. Теория хемосорбции: Пер. с англ. / Ред. Дж. Смит. М.: Мир, 1983.
210. *Kuramoto Y., Kitaoka Y.* Dynamics of Heavy Electrons. Oxford: Clarendon Press, 2000.
211. *Flouquet J.* On the Heavy Fermion Road // *Prog. Low Temp. Phys.* 2005. V. 15. P. 139.
212. *Herring C.* State of d -electrons in Transition Metals // *J. Appl. Phys.* 1960. V. 31. P. 1.
213. *Bach V., Lieb E. H., Travaglia M. V.* Ferromagnetism of the Hubbard Model at Strong Coupling in the Hartree–Fock Approximation // *Rev. Math. Phys.* 2006. V. 18. P. 519.
214. *Tanaka A., Tasaki H.* Metallic Ferromagnetism in the Hubbard Model: A Rigorous Example // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. P. 116402.
215. *Вильсон К. Дж.* Ренормализационная группа и критические явления // УФН. 1983. Т. 141. С. 193.
216. *Laughlin R. D., Pines D.* Theory of Everything // *Proc. Nat. Acad. Sci. (USA)*. 2000. V. 97. P. 28.
217. *Cox D. L., Pines D.* Complex Adaptive Matter: Emergent Phenomena in Materials // *MRS Bull.* 2005. V. 30. P. 425.
218. *Stearns M. B.* Why Is Iron Magnetic? // *Phys. Today*. 1978. No. 4. P. 34.
219. *Каганов М. И., Цукерник В. М.* Природа магнетизма. М.: Наука, 1982.
220. *Skomski R.* Simple Models of Magnetism. Oxford: Oxford Univ. Press, 2008.
221. *тер Хаар Д.* Введение в физику систем многих частиц. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
222. *Nozieres P.* Interacting Fermi Systems. N. Y.: Benjamin, 1963.
223. *Pines D.* Elementary Excitations in Solids. N. Y.: Benjamin, 1963.
224. *Negele J. W., Orland H.* Quantum Many Particle Systems. N. Y.: Addison-Wesley, 1988.
225. *Mahan G. D.* Many-Particle Physics. 3rd ed. N. Y.: Kluwer Acad. Publ., 2000.
226. *Hoddeson L., Daitch V.* True Genius. The Life and Science of John Bardeen. Washington: Joseph Henry Press, 2002.
227. *Бардин Дж., Шриффер Дж.* Новое в изучении сверхпроводимости. М.: Физматгиз, 1962.
228. *Bogoliubov N. N.* On a New Method in the Theory of Superconductivity. I // *Nuovo Cim.* 1958. V. 7. P. 794.

229. Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В. Новый метод в теории сверхпроводимости. М.: Изд-во АН СССР, 1958.
230. Боголюбов Н. Н. К вопросу о модельном гамильтониане в теории сверхпроводимости. Препринт ОИЯИ Р-511. Дубна, 1960; ЭЧАЯ. 1971. Т. 1. С. 301.
231. Haag R. The Mathematical Structure of the Bardeen–Cooper–Schrieffer Model // Nuovo Cim. 1962. V. 25. P. 287.
232. Schwinger J. On the Green's Functions of Quantized Fields. I // Proc. Nat. Acad. Sci. (USA). 1951. V. 37. P. 452.
233. Schwinger J. On the Green's Functions of Quantized Fields. II // Ibid. P. 455.
234. Schwinger J. The Greening of Quantum Field Theory // Julian Schwinger / Ed. Y. Jack Ng. Singapore, 1996. P. 13–27.
235. Matsubara T. A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics // Prog. Theor. Phys. 1955. V. 14. P. 351.
236. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматлит, 1963.
237. Мотт Н. Переходы металл–изолятор. М.: Наука, 1979.
238. Боголюбов Н. Н. О представлении функций Грина–Швингера при помощи функциональных интегралов // Докл. АН СССР. 1954. Т. 99. С. 225.
239. Schweber S. S. The Sources of Schwinger's Green's Functions // Proc. Nat. Acad. Sci. (USA). 2005. V. 102. P. 7783.
240. Mehra J., Milton K. A. Climbing the Mountain. The Scientific Biography of Julian Schwinger. Oxford; N. Y.: Oxford Univ. Press, 2000.
241. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. Запаздывающие и опережающие функции Грина в статистической механике // Докл. АН СССР. 1959. Т. 126. С. 53.
242. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М.: Физматгиз, 1961.
243. Зубарев Д. Н. Двухвременные функции Грина в статистической механике // УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
244. Matsubara T. Note on the Generating Function of Two-Time Green Functions // Progr. Theor. Phys. 1964. V. 32. P. 50.
245. Duffy D. G. Green's Functions with Applications. N. Y.: Chapman and Hall/CRC, 2001.
246. Любимов Ю. А. Джордж Грин: жизненный путь и творчество // УФН. 1994. Т. 164. С. 105.
247. Callen H. B., Welton T. A. Irreversibility and Generalized Noise // Phys. Rev. 1951. V. 83. P. 34.
248. Bonch-Bruевич V. L., Kogan Sh. M. On the Theory of the Temperature Green's Functions // Ann. Phys. (N. Y.). 1960. V. 9. P. 125.

-
249. Церковников Ю. А. К теории неидеального бозе-газа при температуре, отличной от нуля // Докл. АН СССР. 1962. Т. 143. С. 832.
250. Церковников Ю. А. К вопросу о втором звуке в неидеальном бозе-газе // Докл. АН СССР. 1966. Т. 169. С. 1064.
251. Плакида Н. М. Расцепление двухвременных функций Грина и диаграммный анализ // ТМФ. 1970. Т. 5. С. 147.
252. Plakida N. M. Dyson Equation for Heisenberg Ferromagnet // Phys. Lett. A. 1973. V. 43. P. 481.
253. Kuzemsky A. L. Irreducible Green Function Method in the Theory of Many-Body Systems with Complex Spectrum and Strong Interaction // Proc. of the V Intern. Symp. «Selected Topics in Statistical Mechanics» / Eds. A. A. Logunov, N. N. Bogolubov (Jr.), V. G. Kadyshevsky, A. S. Shumovsky. Singapore, 1990. P. 157–169.
254. Kuzemsky A. L. Quasiparticle Many-Body Dynamics of the Highly Correlated Electronic Systems // Molecular Physics Reports. 1997. V. 17. P. 221–246.
255. Kuzemsky A. L. Itinerant Antiferromagnetism of Correlated Lattice Fermions // Physica A. 1999. V. 267. P. 131–152; cond-mat/0208242.
256. Zwanzig R. Ensemble Method in the Theory of Irreversibility // J. Chem. Phys. 1960. V. 33. P. 1338.
257. Zwanzig R. Nonequilibrium Statistical Mechanics. Oxford: Oxford Univ. Press, 2001.
258. Mori H. Transport, Collective Motion, and Brownian Motion // Prog. Theor. Phys. 1965. V. 33. P. 423.
259. Mori H. A Continued-Fraction Representation of the Time-Correlation Function // Prog. Theor. Phys. 1965. V. 34. P. 399.
260. Ichiyanagi M. Projection Operators in the Theory of Two-Time Green Functions // J. Phys. Soc. Japan. 1972. V. 32. P. 604.
261. Церковников Ю. А. О методе решения бесконечных систем уравнений для двухвременных температурных функций Грина // ТМФ. 1981. Т. 49. С. 219.
262. Balucani U., Lee M. H., Tognetti V. Dynamical Correlations // Phys. Rep. 2003. V. 373. P. 409.
263. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехтеоретиздат, 1946.
264. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
265. Китнис А. Я., Явелов Б. Е. Иоганнес Дидерик Ван дер Ваальс. М.: Наука, 1985.
266. Уравнения состояний газов и жидкостей. К столетию уравнения Ван дер Ваальса: Сб. / Под ред. И. И. Новикова. М.: Наука, 1975.
267. Иванов А. А. Среднее поле в описании магнитной структуры ультрадисперсных магнетиков // ФММ. 2007. Т. 104. С. 465.

268. *Callen H. B., Shtrikman S.* A Probability Density Common to Molecular Field and Collective Excitation Theories of Ferromagnetism // *Solid State Commun.* 1965. V. 3. P. 5.
269. *Behringer H., Pleimling M., Huller A.* Phase Transitions in a Cluster Molecular Field Approximation // *Eur. Phys. J. B.* 2003. V. 31. P. 81.
270. Антиферромагнетизм: Сб. / Под ред. С. В. Вонсовского. М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
271. *Anderson P. W.* An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State // *Phys. Rev.* 1952. V. 86. P. 694.
272. *Thouless D. J.* Long-Range Order in the Antiferromagnetic Ground State // *Proc. Phys. Soc.* 1967. V. 90. P. 243.
273. *Caspers W. J.* Renormalization Techniques for Quantum Spin Systems. Ground State Energies // *Phys. Rep.* 1980. V. 63. P. 223.
274. *Misguich G. et al.* Degeneracy of the Ground-State of Antiferromagnetic Spin-1/2 Hamiltonians // *Eur. Phys. J. B.* 2002. V. 26. P. 167.
275. *Куркин М. И.* Волновая функция антиферромагнитно упорядоченных спинов. Условия формирования магнитных подрешеток // *Укр. физ. журн.* 2005. Т. 50. С. А22.
276. *Куркин М. И.* Условия стабильности магнитных подрешеток при обменном смешивании состояний с различными спинами // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2007. Т. 71. С. 1648.
277. *Onsager L.* Electric Moments of Molecules in Liquids // *J. Am. Chem. Soc.* 1936. V. 58. P. 1486.
278. *Gouvea M. E., Pires A. S., Wysin G. M.* Onsager Reaction Field Theory for the Three-Dimensional Anisotropic XY Model // *Phys. Rev. B.* 1998. V. 58. P. 2399.
279. *Wysin G. M., Kaplan J.* Correlated Molecular-Field Theory for Ising Models // *Phys. Rev. E.* 2000. V. 61. P. 6399.
280. *Wysin G. M.* Onsager Reaction-Field Theory for Magnetic Models on Diamond and hcp Lattices // *Phys. Rev. B.* 2000. V. 62. P. 3251.
281. *Медведев М. В.* Приближение онсагеровского поля реакции для ферромагнетика с одноионной анизотропией // *ФММ.* 2007. Т. 103. С. 15.
282. *Kinoshita T., Nambu Y.* The Collective Description of Many-Particle Systems (A Generalized Theory of Hartree Fields) // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. P. 598.
283. *Takahashi M.* Generalization of Mean-Field Approximations by the Feynman Inequality and Application to Long-Range Ising Chain // *J. Phys. Soc. Japan.* 1981. V. 50. P. 1854.
284. *Soldatov A. V.* Generalization of the Peierls–Bogoliubov Inequality by Means of a Quantum-Mechanical Variational Principle // *ЭЧАЯ.* 2000. Т. 31, вып. 7. С. 138.
285. *Боголюбов Н. Н. (мл.)* Приближение Хартри–Фока–Боголюбова в моделях с четырехфермионным взаимодействием // *Проблемы современной математической физики: Тр. МИРАН.* 2000. Т. 228. С. 264.

-
286. *Callen H. B.* Green Function Theory of Ferromagnetism // *Phys. Rev.* 1963. V. 130. P. 890.
287. *Медведев М. В.* Ближний магнитный порядок в анизотропном ферромагнетике в приближении Тябликова // *ФММ.* 2008. Т. 106. С. 451.
288. *Czachor A., Holas A.* Extension of the Random-Phase-Approximation Theory of Ferromagnetism in a Magnetic Field Applicable at All Temperatures // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. P. 4674.
289. *Куземский А. Л., Марваков Д.* Спектр возбуждений гейзенберговского антиферромагнетика при конечных температурах // *ТМФ.* 1990. Т. 83. С. 147–157 [English Transl.: *Theor. Math. Phys.* 1990. V. 83. P. 441].
290. *Roth L. M.* Electron Correlation in Narrow Energy Bands. I. The Two-Pole Approximation in a Narrow s Band // *Phys. Rev.* 1969. V. 184. P. 451.
291. *Roth L. M.* Electron Correlation in Narrow Energy Bands. II. One Reversed Spin in an Otherwise Fully Aligned Narrow s Band // *Ibid.* V. 186. P. 428.
292. *Вуйич Г., Куземский А. Л., Плакида Н. М.* Уравнения сверхпроводимости для переходных металлов в представлении Ванье // *ТМФ.* 1982. Т. 53. С. 138–145 [English Transl.: *Theor. Math. Phys.* 1982. V. 53. P. 1035].
293. *Marvakov D., Kuzemsky A. L., Vlahov J.* A Self-consistent Theory of the Magnetic Polaron // *Physica B.* 1986. V. 138. P. 129–140.
294. *Kuzemsky A. L.* Bound and Scattering State of Itinerant Charge Carriers in Complex Magnetic Materials // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 2004. V. 18. P. 3227–3266; cond-mat/0408404.
295. *Shastry B. S., Mattis D. C.* Theory of the Magnetic Polaron // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 24. P. 5340.
296. *Anderson P. W.* Coherent Excited States in the Theory of Superconductivity: Gauge Invariance and the Meissner Effect // *Phys. Rev.* 1958. V. 110. P. 827.
297. *Nambu Y.* Quasi-Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity // *Phys. Rev.* 1960. V. 117. P. 648.
298. *Nambu Y., Jona-Lasinio G.* Dynamical Model of Elementary Particles Based on an Analogy with Superconductivity. I // *Phys. Rev.* 1961. V. 122. P. 345.
299. *Goldstone J.* Field Theories with «Superconductor» Solution // *Nuovo Cim.* 1961. V. 19. P. 154.
300. *Bludman S. A., Klein A.* Broken Symmetries and Massless Particles // *Phys. Rev.* 1963. V. 131. P. 2364.
301. *Anderson P. W.* Plasmons, Gauge Invariance and Mass // *Ibid.* V. 130. P. 439.
302. *Higgs P. W.* Spontaneous Symmetry Breakdown without Massless Bosons // *Phys. Rev.* 1966. V. 145. P. 1156.
303. *Wagner H.* Long-Wavelength Excitations and the Goldstone Theorem in Many-Particle Systems with «Broken Symmetries» // *Z. Phys.* 1966. V. 195. P. 273.

304. *Форстер Д.* Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980.
305. *Киржниц Д. А.* Сверхпроводимость и элементарные частицы // УФН. 1978. Т. 125. С. 169.
306. *Боголюбов Н. Н.* Цветные кварки — новая ступень познания микромира. Препринт ОИЯИ Д2-85-206. Дубна, 1985; Вестн. АН СССР. 1985. № 6. С. 54.
307. *Гриб А. А.* Проблема неинвариантности вакуума в квантовой теории поля. М.: Атомиздат, 1978.
308. *Strocchi F.* Symmetry Breaking. Berlin: Springer, 2005.
309. *Du Qiang.* Numerical Approximations of the Ginzburg–Landau Model for Superconductivity // J. Math. Phys. 2005. V. 46. P. 095109.
310. *Anderson P. W.* Basic Notions of Condensed Matter Physics. N. Y.: W. A. Benjamin, 1984.
311. *Heisenberg W., Wagner H., Yamazaki K.* Magnons in a Model with Antiferromagnetic Properties // Nuovo Cim. A. 1969. V. 59. P. 377.
312. *Kolley E., Kolley W.* Higgs Mechanism within a Lawrence–Doniach-type Model for Layered Cuprate Superconductors // Nuovo Cim. B. 2001. V. 116. P. 371.
313. *Whitehead J. P., Matsumoto H., Umezawa H.* Spin Rotational Invariance and the Thermal Excitation of Magnons at Low Temperatures // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 423.
314. *Туров Е. А., Шавров В. Г.* Нарушенная симметрия и магнитоакустические эффекты в ферро- и антиферромагнетиках // УФН. 1983. Т. 140. С. 429.
315. *Anderson P. W.* // Gauge Theories and Modern Particle Theory / Eds. R. Arnowitt, P. Nath. Cambridge, Mass., 1975. P. 311.
316. *Anderson P. W.* Broken Symmetry Can't Compare with Ferromagnet // Phys. Today. 1990. No. 5. P. 117.
317. *Nambu Y.* From Yukawa's Pion to Spontaneous Symmetry Breaking // J. Phys. Soc. Japan. 2007. V. 76. P. 111002.
318. *Curie P.* // J. Phys. Theor. et Appl. 4e ser. 1894. V. 3. P. 393.
319. *Кюри П.* Избр. тр. М.: Изд-во АН СССР, 1966. (Классики науки).
320. *Кюри М.* Пьер Кюри: Сб. / Под ред. И. М. Франка. М.: Физматлит, 1968.
321. *Nye J. F.* Physical Properties of Crystals. Oxford: Clarendon Press, 1964.
322. *Kulske C., Le Ny A.* Spin-flip of the Curie–Weiss Model: Loss of Gibbsianness with Possibly Broken Symmetry // Commun. Math. Phys. 2007. V. 271. P. 431.
323. *Шубников А. В., Концик В. А.* Симметрия в науке и искусстве. М.: Наука, 1972.
324. *Кальоти Дж.* От восприятия к мысли. О динамике неоднозначного и нарушениях симметрии в науке и искусстве. М.: Мир, 1998.
325. *Chatterjee S. K.* Crystallography and the World of Symmetry. Berlin: Springer, 2008.

326. Боголюбов Н. Н. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ Д-781. Дубна, 1961; Статистическая физика и квантовая теория поля. М., 1973. С. 7.
327. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. Некоторые вопросы статистической механики. М.: Высш. шк., 1975.
328. Overhauser A. W. Spin Density Waves in an Electron Gas // *Phys. Rev.* 1962. V. 128. P. 1437.
329. Koma T., Tasaki H. Symmetry Breaking and Finite-Size Effects in Quantum Many-Body Systems // *J. Stat. Phys.* 1994. V. 76. P. 745.
330. Koma T., Tasaki H. Symmetry Breaking and Long Range Order in Heisenberg Antiferromagnet // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70. P. 93.
331. Bach V., Lieb E. H., Solovej J. P. Generalized Hartree–Fock Theory and the Hubbard Model // *J. Stat. Phys.* 1994. V. 76. P. 3.
332. Tasaki H. Stability of Ferromagnetism in Hubbard Models with Nearly Flat Bands // *J. Stat. Phys.* 1996. V. 84. P. 535.
333. Penn D. R. Stability Theory of the Magnetic Phases for a Simple Model of the Transition Metals // *Phys. Rev.* 1966. V. 142. P. 350.
334. Penn D. R., Cohen M. H. Antiferromagnetism in Simple Metals // *Phys. Rev.* 1967. V. 155. P. 468.
335. Thalmeier P., Falicov L. M. Broken-Symmetry States in Solids with Multiple Bands // *Phys. Rev. B.* 1980. V. 22. P. 2456.
336. Callaway J., Kanhere D. G. Band Model of Antiferromagnetism // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49. P. 12823.
337. Ketterson J. B., Song S. N. Superconductivity. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1999.
338. Lawrence W. E., Doniach S. Theory of Layer Structure Superconductors // *Proc. of the 12th Intern. Conf. on Low Temp. Phys.*, 1970 / Ed. E. Kanda. Tokyo, 1971. P. 361.
339. Kuzemsky A. L., Kuzemskaya I. G., Cheglov A. A. Superconducting Properties of the Family of the Mercurocuprates and Role of Layered Structure // *J. Low Temp. Phys.* 2000. V. 118. P. 147–152.
340. Kuzemsky A. L., Kuzemskaya I. G. Structural Sensitivity of Superconducting Properties of Layered Systems // *Physica C.* 2002. V. 383. P. 140–158.
341. Kuzemsky A. L., Kuzemskaya I. G. The Structural, Superconducting and Transport Properties of the Mercurocuprates and Other Layered Systems // *Studies in High- T_c Superconductors* / Ed. A. Narlikar. N. Y., 2003. V. 44. P. 1–80.
342. Chapman S. J., Du Q., Ginzburger M. D. On the Lawrence–Doniach and Ginzburg–Landau Models for Layered Superconductors // *SIAM J. Appl. Math.* 1995. V. 55. P. 156.

343. *Chen Z., Hoffmann K.H., Jiang L.* On the Lawrence–Doniach Model for Layered Superconductors // *Eur. J. Appl. Math.* 1997. V. 8. P. 369.
344. *Bauman P., Ko Y.* Analysis of Solutions to the Lawrence–Doniach System for Layered Superconductors // *SIAM J. Math. Anal.* 2005. V. 37. P. 914.
345. *Radtke R.J., Levin K.* Origin of Intrinsic Josephson Coupling in the Cuprates and Its Relation to Order Parameter Symmetry: An Incoherent Hopping Model // *Physica C.* 1995. V. 250. P. 282.
346. *Зубарев Д. Н.* Неравновесные статистические операторы и квазисредние в теории необратимых процессов. Препринт ОИЯИ Р4-4886. Дубна, 1970.
347. *Зубарев Д. Н.* Граничные условия для статистических операторов в теории неравновесных процессов и квазисредние // *ТМФ.* 1970. Т. 3. С. 276.
348. *Gell-Mann M., Goldberger M.L.* The Formal Theory of Scattering // *Phys. Rev.* 1953. V. 91. P. 398.
349. *Goldberger M. L., Watson K.* Collision Theory. N. Y.: John Wiley and Sons, 1964.
350. *Petrosky T., Prigogine I.* Thermodynamic Limit, Hilbert Space and Breaking of Time Symmetry // *Chaos, Solitons and Fractals.* 2000. V. 11. P. 373.
351. *Покровский Л. А.* Необратимые процессы в системе с внутренними вращениями // Докл. АН СССР. 1967. Т. 177. С. 1054.
352. *Покровский Л. А.* Применение неравновесного статистического оператора в теории обмена энергией между двумя подсистемами // Докл. АН СССР. 1968. Т. 182. С. 317.
353. *Покровский Л. А.* Получение обобщенных кинетических уравнений с помощью неравновесного статистического оператора // Там же. Т. 183. С. 806.
354. *Валясек К., Куземский А. Л.* Кинетические уравнения для системы в термостате // *ТМФ.* 1970. Т. 4. С. 267–276 [English Transl.: *Theor. Math. Phys.* 1971. V. 4. P. 826].
355. *Валясек К., Зубарев Д. Н., Куземский А. Л.* Уравнение типа Шредингера с затуханием для динамической системы в термостате // *ТМФ.* 1970. Т. 5. С. 280–292 [English Transl.: *Theor. Math. Phys.* 1971. V. 5. P. 1150].
356. *Kuzemsky A. L.* Generalized Kinetic and Evolution Equations in the Approach of the Nonequilibrium Statistical Operator // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 2005. V. 19. P. 1029–1059; cond-mat/050219.
357. *Kozlov V. V.* Gibbs Ensembles, Equidistribution of the Energy of Sympathetic Oscillators and Statistical Models of Thermostat // *Regular and Chaotic Dynamics.* 2008. V. 13, No. 3. P. 141.
358. *Bogoliubov N. N.* On the Stochastic Processes in Dynamical Systems. JINR Preprint E17-10514. Dubna, 1977; *Боголюбов Н. Н.* О стохастических процессах в динамических системах // *ЭЧАЯ.* 1978. Т. 9. С. 501.
359. *Mott N. F., Massey H. S.* The Theory of Atomic Collisions. Oxford: Clarendon Press, 1965.

-
360. *Korringa J.* Dynamical Decomposition of a Large System // *Phys. Rev. A.* 1964. V. 133. P. 1228.
361. *Kostin M. D.* On the Schrödinger–Langevin Equation // *J. Chem. Phys.* 1972. V. 57. P. 3589.
362. *Polychronakos A. P., Tzani R.* Schrödinger Equation for Particle with Friction // *Phys. Lett. B.* 1993. V. 302. P. 255.
363. *Kuzemsky A. L., Walasek K.* On the Calculation of the Natural Width of Spectral Lines of Atom by the Methods of Nonequilibrium Statistical Mechanics // *Lett. Nuovo Cim.* 1971. V. 2. P. 953–956.
364. *Ivic Z. et al.* Influence of Phonon Fluctuations on Soliton Dynamics in the Easy-Axis Heisenberg Model // *Physica Scripta.* 1991. V. 43. P. 528.
365. *Vasconcellos A. R., Luzzi R.* Vanishing Thermal Damping of Davydov’s Solitons // *Phys. Rev. E.* 1993. V. 48. P. 2246.
366. *Luzzi R., Vasconcellos A. R.* Complexity, Dissipation, Order Out of Chaos and Chaos Out of Order // *Braz. J. Phys.* 1994. V. 24. P. 875.
367. *Mesquita M. V., Vasconcellos A. R., Luzzi R.* Near-Dissipationless Coherent Excitations in Biosystems // *Intern. J. Quant. Chem.* 1996. V. 60. P. 689.
368. *Mesquita M. V., Vasconcellos A. R., Luzzi R.* Solitons in Highly Excited Matter: Dissipative-Thermodynamic and Supersonic Effects // *Phys. Rev. E.* 1998. V. 58. P. 7913.
369. *Luzzi R., Vasconcellos A. R., Ramos J. G.* A Nonequilibrium Statistical Ensemble Formalism // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 2000. V. 14. P. 3189.
370. *Mesquita M. V. et al.* System Biology: An Information-Theoretic-Based Thermo-Statistical Approach // *Braz. J. Phys.* 2004. V. 34. P. 459.
371. *Mesquita M. V., Vasconcellos A. R., Luzzi R.* Considerations on Undistorted-Progressive X-waves and Davydov Solitons, Frohlich–Bose–Einstein Condensation, and Cherenkov-Like Effect in Biosystems // *Ibid.* P. 489.
372. *Kuzemsky A. L.* Statistical Theory of Spin Relaxation and Diffusion in Solids // *J. Low Temp. Phys.* 2006. V. 143. P. 213–256.
373. *Ramanathan C.* Dynamic Nuclear Polarization and Spin-Diffusion in Nonconducting Solids // *Appl. Magn. Res.* 2008. V. 34. P. 409.
374. *Tanimura Y.* Stochastic Liouville, Langevin, Fokker–Planck, and Master Equation Approaches to Quantum Dissipative Systems // *J. Phys. Soc. Japan.* 2006. V. 75. P. 082001-1.
375. *Ishizaki A., Tanimura Y.* Nonperturbative Non-Markovian Quantum Master Equation: Validity and Limitation to Calculate Nonlinear Response Functions // *Chem. Phys.* 2008. V. 347. P. 185.