

539.184(049.3)

## ТЕОРИЯ МНОГИХ ТЕЛ В АТОМНЫХ РАСЧЕТАХ

Lindgren I., Morrison J. Atomic Many-body Theory. — Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1982. — 469 p. — (Springer Series in Chemical Physics. V. 13).

Написанная специалистами, активно работающими в области теоретической атомной спектроскопии, книга представляет собой учебник промежуточного уровня для студентов старших курсов и аспирантов. Цель книги, по замыслу авторов, — на уровне, доступном и для экспериментаторов, ознакомить читателя с основными методами теории атома в той форме, в которой они наиболее широко используются в настоящее время в оригинальных научных статьях.

Книга состоит из двух частей. В ее первой части излагается теория углового момента, метод Хартри — Фока и построение волновых функций многоэлектронного атома в приближении генеалогической схемы, т. е. вопросы, традиционные для книг по теории атома. Подача материала, однако, значительно отличается от всех известных учебников и основывается на графической технике угловых моментов, впервые введенной в употребление А. П. Юдисом и сотрудниками. Изложение теории углового момента дается весьма подробно и довольно элементарно, аппарат теории групп не используется, тем не менее к концу первой части книги читатель подводится к решению достаточно сложных задач, таких, например, как вычисление угловых коэффициентов для переходов, затрагивающих две не полностью заполненные оболочки.

За теорией углового момента следует краткое описание модели независимых частиц (оболочечной модели) и схематический вывод уравнений Хартри — Фока. Затем столь же кратко излагается приближение центрального поля и элементарная теория электростатического расщепления электронной конфигурации на термы. Дается довольно подробный анализ метода Хартри — Фока. Завершает первую часть описание волновых функций многоэлектронного атома в одноконфигурационном приближении и процедуры вычисления матричных элементов одно- и двухэлектронных симметричных операторов. Вводится графическое представление генеалогических коэффициентов.

Вторая, большая по объему часть книги посвящена изложению методов учета многочастичных (корреляционных) эффектов с помощью теории возмущений. Выход за рамки одноконфигурационного приближения возможен при использовании различных вариационных процедур — с учетом взаимодействия конфигураций, либо в приближении многоконфигурационного метода Хартри — Фока. В последние годы вариационные методы использовались довольно часто, однако они не обладают достаточной гибкостью и универсальностью, а кроме того, требуют в большинстве случаев весьма громоздких вычислений. Наибольшие успехи в практических расчетах для многоэлектронных атомов достигнуты именно современными методами теории возмущений, для которых в качестве нулевого приближения принимается приближение Хартри — Фока. При изложении теории возмущений авторы используют диаграммную технику (так называемые гольдстоуновские диаграммы) совместно с графической техникой угловых моментов, описанной в первой части книги. В таком подходе многочисленные суммы произведений  $3nj$ -символов значительно упрощаются и результаты выглядят весьма компактно. Диаграммная техника вводится на примере первого порядка теории возмущений, затем дается описание вторичного квантования и способов учета поправок высших порядков для различных атомных систем. Из конкретных приложений методов теории возмущений наибольшее внимание уделяется вычислению волновых функций и энергий для уровней основной конфигурации, а также расчету сверхтонкой структуры. Заканчивается книга описанием разработанных в последние годы способов учета парных корреляций во всех порядках.

Книга не охватывает всего круга вопросов современной теории атома, что, естественно, и невозможно при ее сравнительно небольшом объеме. В ней слабо затронуты вопросы вычисления оптических характеристик атомов, отсутствует описание метода Томаса — Ферми, который в применении к атомам в последние годы заметно усовершенствован, не излагается теория атома во внешних полях. Весь изложенный материал ограничивается нерелятивистским приближением для атомных волновых функций. Практически отсутствуют также и ссылки на обзорную литературу по релятивистской теории атома, которая весьма интенсивно разрабатывается в последнее время.

Текст книги написан весьма ясно, излагаемый материал хорошо иллюстрирован конкретными примерами, имеется ряд задач и упражнений. Для понимания материала достаточно знакомства с обычным университетским курсом квантовой механики. По всем затронутым вопросам даны ссылки на специальные монографии, обзоры и оригинальные работы, хотя по мнению рецензента список полезных книг и обзоров можно было бы расширить. В целом же книга является удачным дополнением к имеющимся в настоящее время учебникам и монографиям по теории атома.

Е. А. Юков