1968 г. Октябрь *Том 96, вып. 2*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

БИБЛИОГРАФИЯ

019.941.530.145

Terry Loucks. Augmented Plane Wave Method: A Guide to Performing Electronic Structure Calculations. W. A. Benjamin Inc., New York, 1967, XIV + 256 стр. (Frontiers in Physics Series, David Pines, Editor).

Метод присоединенных плоских волн, предложенный Слэтером, предназначен для расчета многоэлектронных систем, наряду с другими методами, предложенными для этой цели [(см. краткое и очень ясное изложение в книге Займана «Принципы теории твердых тел» (гл. 3, особенно стр. 110—114 русского перевода)]. Рецензируемая книга представляет собой расширенное изложение лекций, читанных на семинаре для студентов старших курсов Университета штата Айова. Задача книги — объяснить, как надо выполнять вычисление по методу АПВ (краткое обозначение — метод APW (АПВ), возможно, получит право гражданства). У читателя предполагаются элементарные сведения по квантовой механике и теории Блоха электронов в идеальном кристалле.

Книга построена очень своеобразно. Первая глава представляет собой введение, в котором дается сравнение метода, предложенного Слэтером еще в 1937 г., но до 1960 г. почти не применявшегося. Начиная с 1960 г. в течение последующих лет метод стал применяться все чаще. Причина очевидна: появление быстродействующих электронных вычислительных машин позволило выполнять утомительные расчеты требуемым методом. Во второй главе дается детальное развитие теоретических основ метода. Третья глава носит чисто практический характер: в ней собрано все, что на первых порах необходимо изучающему для применения метода. Последняя глава посвящена релятивистскому обобщению метода. Наконец, для тех, кто не имеет желания вникнуть в детали формализма, а просто хочет получить интересующие их результаты, в заключение дается полный набор всех расчетных программ, необходимых для вычислений по методу АПВ.

В конце книги — и в этом ее своеобразная особенность — воспроизводится ряд оригинальных работ, начиная с работы Слэтера 1937 г. и кончая работами автора, посвященных вычислениям при помощи метода АПВ поверхности Ферми в различных металлах.

S.