

P. Gombás. Pseudopotentials. Springer — Verlag, Wien — New York, 1967, 136 S.

Псевдопотенциалы — это потенциалообразные функции, используемые для упрощенного представления взаимодействия. Метод псевдопотенциалов, использующий несложный математический аппарат, весьма простой на практике и в то же время дающий довольно хорошие результаты, получает все большее применение. Он с успе-

хом может использоваться как в теории атома и твердого тела, так и в квантовой химии или квантовой биологии. Однако, несмотря на актуальность, до настоящего времени в литературе не было книги, представляющей систематическое изложение данной проблемы.

Автор рецензируемой книги — известный венгерский физик-теоретик П. Гомбаш (ему принадлежит также широко известная монография «Статистическая теория атома и ее применения» и др.), внесший своими работами огромный вклад в развитие статистической модели, взял на себя труд изложить метод псевдопотенциалов.

В книге рассматриваются псевдопотенциалы: обменный потенциал, корреляционный потенциал и потенциал, запрещающий заполнение Паули как с точки зрения теории, так и (что особенно важно) с точки зрения практического их применения. Книга состоит из введения, пяти глав и приложения. Во введении дается постановка и общий обзор проблемы псевдопотенциала, а также краткий исторический очерк.

В главе I «Основные положения» дается обзор и краткое изложение результатов квантовой и статистической теорий атома, необходимых для дальнейшего изложения. При этом основное внимание уделяется методам самосогласованного поля Хартри — Фока и статистической модели Томаса — Ферми.

В главе II «Обменные потенциалы» излагается вопрос об аппроксимации обменного потенциала усредненным обменным потенциалом, а также соответствующими статистическими выражениями. Обсуждается вопрос о применении этих выражений для упрощения уравнений Фока и определения обменной энергии валентного электрона. С главой II тесно связано и приложение «Исправление статистического обменного потенциала», выражающееся в том, что исключаются граничные области с очень малой плотностью электронов.

В главе III «Корреляционные потенциалы» излагается вопрос о приближенном представлении энергии корреляции при помощи усредненного корреляционного потенциала и соответствующего статистического выражения. Обсуждается вопрос об использовании корреляционных потенциалов для дополнения уравнений самосогласованного поля, а также для вычисления энергии корреляции.

В главе IV «Статистические запрещающие заполнения потенциалы» излагается вопрос об обеспечении принципа Паули путем введения потенциалов отталкивания. Обсуждается вопрос о применении запрещающих заполнения потенциалов в теории атома, а также в теориях металлов и атомного ядра. Излагается упрощенный метод самосогласованного поля атома и статистическая оболочечная модель атома.

В главе V «Нелокальные запрещающие заполнения потенциалы. Запрещающие заполнения операторы» показывается, что запрещающие заполнения потенциалы можно обосновать, исходя из квантовой механики, и в таком случае полученные выражения приобретают форму нелокальных потенциалов или операторов. Они, в противоположность соответствующим статистическим выражениям, могут применяться в случае отдельных единичных состояний, а в случае большого числа состояний переходят в соответствующие статистические выражения.

Книга написана исключительно простым и доходчивым, свойственным П. Гомбашу, языком и читается легко. Она полезна как для физиков, так и для представителей смежных отраслей науки. В ней излагается с предельной ясностью в весьма краткой форме большой материал, выбранный из многих, разных по стилю и характеру, рассеянных по журналам статей. Особенно важным и ценным качеством книги является то, что наряду с изложением теории систематически приводится ее применение для решения практических задач, причем результаты доводятся до числа.

Ценность книги повышается и тем фактом, что ее автор лично внес огромный вклад в развитие метода псевдопотенциалов.

Нет сомнения, что книга окажет неоценимую помощь всем, кто желает применить метод псевдопотенциала в своих исследованиях (начиная с теории атома и ядра и кончая квантовой химией или даже квантовой биологией).

*А. П. Юцис, И. И. Глембоцкий*