1985 г. Ноябрь *Том 147, вып. 3*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

БИБЛИОГРАФИЯ

530.145(049.3)

ВИБРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

Берсукер И. Б., Полингер В. З. Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах.— М. Наука. Гл. ред. физ.-мат. литературы, 1983.—336 с.

По современным квантовомеханическим представлениям стало традиционным проводить решение задач по теории молекул и кристаллов, считая их системами, состоящими из совокупности двух достаточно автономных подсистем: атомных ядер или ионных остовов (1) и коллективизированных (в основном бывших валентных) электронов (2). Такой подход значительно упрощал количественную трактовку указанных выше задач. В его основе, кроме того, использовался, казалось бы, очень естественный малый безразмерный параметр — отношение массы свободного электрона m к массе ядра (ионного остова) M: $m/M \ll 1$ (действительно, даже в случае наилегчайшего атомного ядра самого легкого изотопа водорода это отношение равно $\sim 1/1836$). Обычно этот подход, где используется малость отношения m/M, называют адиабатическим приближением; его строгий количественный критерий был сформулирован М. Борном и Р. Оппенгеймером еще в 1927 г. Однако уже вскоре после работы этих ученых стала очевидной необходимость в ряде случаев отказа от адиабатического приближения. В частности, здесь следует упомянуть об оставшихся неопубликованными соображениях Л. Д. Ландау, о которых имеется лишь сообщение в монографии, посвященной эффекту Яна — Теллера. Вначале эти соображения не имели никаких экспериментальных доказательств, и лишь после интенсивного развития техники ЭПР в 50-х годах открылась возможность детального изучения строения многочастичных систем, в которых удалось открыть эффекты, которые принципиально не могли быть обнаружены при подходе, основанном на адиабатическом приближении.

Таким образом, в последнюю четверть века в физике молекул и кристаллов возникло новое направление, основанное на отказе от раздельного описания движений электронов и ядер в адиабатическом приближении и учитывающее сложные взаимодействия последних посредством «смешивания» электронных состояний с ядерными смещениями. В литературе работы этого направления часто публикуются под названием только что упомянутого эффекта Яна — Теллера, который в свою очередь является одним из электронно-колебательных, или, как теперь уже стало принято говорить, *вибронных*, эффектов, вытекающих из указанного более точного описания многоатомных систем при наличии электронного вырождения. Кроме эффекта Яна — Теллера существен также эффект Реннера (он касается явления неустойчивости линейных многоатомных частиц) и другие вибронные эффекты. В настоящее время они стали весьма существенными практически во всех областях физики и химии молекул и кристаллов. Наиболее важными достижениями в этом направлении являются создание неадиабатической теории электронно-колебательных взаимодействий в молекулах и кристаллах, предсказание нового типа вибронных состояний и их проявлений в спектроскопии, подтвержденное экспериментально, создание вибронной теории сегнетоэлектричества, структурных фазовых переходов и других кооперативных явлений в кристаллах. Характерными объектами теории являются примесные центры в кристаллах, регулярные кристаллы с электронно-вырожденными и псевдовырожденными центрами, многоатомные молекулы и всевозможные молекулярные образования, в частности соединения переходных металлов и редкоземельных элементов, в том числе в кристаллической фазе, ряд биологических объектов и многое другое.

Монография И. Б. Берсукера и В. З. Полингера «Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах» — это первое систематическое изложение теории вибронных взаимодействий и ее основных применений. В гл. I изложена теория адиабатического приближения, дан вывод вибронного гамильтониана в рамках обобщенного приближения Борна — Оппенгеймера, обсуждаются различные аспекты теоремы Яна — Теллера. Детальный анализ адиабатических потенциалов ян-теллеровских систем и обсуждение их симметрии дается в гл. II. Центральной в книге является гл. III, в которой изложены методы решения вибронных задач (как аналитические, так и численные) и обсуждаются многочисленные результаты расчетов вибронных спектров. Следует отметить отличительную черту моно-

графии: в ней повсюду сложные решения задач теории обязательно сопровождаются наглядной физической интерпретацией. Отметим также четкое изложение сущности вибронной редукции физических величин.

Во второй части книги (гл. IV и V) изложены конкретные приложения теории к основным проблемам спектроскопии и кристаллофизики. Довольно подробно изложена теория формы полос в электронных спектрах, связанных с участием вырожденных термов, тонкая структура спектров, особенности расщепления бесфононной линии. Существенно новые эффекты возникают в инфракрасном поглощении и комбинационном рассеянии света ян-теллеровскими системами. Весьма значительны вибронные эффекты и в явлениях электронного парамагнитного резонанса, которому посвящена значительная часть этого раздела книги.

Серьезным успехом приложений теории следует считать объяснение происхождения структурных фазовых переходов в кристаллах и сегнетоэлектричества (кооперативный эффект и псевдоэффект Яна — Теллера), которое открывает новую страницу в важном разделе кристаллофизики.

В целом монография производит очень благоприятное впечатление.

Книга написана ясно, теоретические рассуждения изложены достаточно подробно, и, что особенно важно, при этом детально обсуждается физический смысл полученных результатов. Авторам удалось сделать наглядными и доступными сложные и не всегда привычные аспекты теории, а некоторые результаты являются вообще совершенно новыми оригинальными работами авторов и приведены в книге впервые.

Недостатком книги является лишь беглое упоминание ряда важных вопросов теории. Так, не обсуждается зонный эффект Яна — Теллера в металлах, связь излагаемых результатов по кооперативным явлениям с известными двухзонными теориями в физике фазовых переходов (теорией Келдыша — Копаева и др.). Некоторые из этих вопросов заслуживают отдельных монографий, и это частично оправдывает принятый в книге сжатый характер изложения.

В целом книга дает свежее представление о последних достижениях в обсуждаемой новой области теоретической физики и содержит много стимулирующих идей. Она достаточно хорошо оформлена, богато иллюстрирована. Знакомство с ней будет безусловно полезным как для начинающих исследователей, так и для всех тех, кто активно работает в области физики и химии молекул и конденсированных систем.

С. В. Вонсовский