538.915(049.3)

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

The Electron Structure of Complex System s/Eds P. Phariseau, W. M. Temmerman.— New York: Plenum Press, 1984.—803 p.— (NATO ASI Series. Ser. B: Physics, V. 113).

Рецензируемая книга представляет собой 113-й том серии трудов конференций по физике, проводимых Институтом высших исследований (Advan-

ced Studies Institute). Естественно, что, как и соответствующие конференции, книги этой серии являются весьма неровными по уровню, однако данный том следует считать удачным. На конференции по электронной структуре сложных систем, проходившей в июле 1982 г. в г. Генте, были представлены довольно обширные лекции по ключевым вопросам электронной теории твердых тел.

По-видимому, неслучайно конференция была проведена в 1982 г. Примерно в это время завершен определенный этап в развитии теории функционала плотности, являющейся основой современной теории электронной структуры (см., например, сб.: Неоднородный электронный газ.— М.: Мир, 1986). Кроме того, сочетание разработанных в конце 70-х годов линейных методов расчетов зонной структуры с появлением мощных компьютеров привело к тому, что практически любые упорядоченные структуры стали доступны расчету, а также многие неупорядоченные структуры и границы раздела.

Эти факторы и многочисленные результаты, полученные в последнее время, позволили по-новому взглянуть на роль зонных расчетов в физике твердого тела. Именно это и является целью вводной лекции известного английского физика Ф. Хейне. Он подчеркивает роль зонных расчетов в понимании физики сложных систем и сложных явлений, а также в уяснении природы количественных различий между качественно близкими системами (например, Ag и Au).

Вторая лекция, написанная О. К. Андерсеном — автором первых линейных методов расчета зонной структуры, ЛМТО и ЛППВ,— посвящена подробному их описанию. В третьей и четвертой лекциях речь идет о функционале плотности. Лекция У. фон Барта относится к применению теории функционала плотности к твердым телам, причем уделено внимание таким малоосвещенным в литературе вопросам, как зависящий от времени функционал и потенциал Толмэна. Лекция Дж. Харриса называется «Расчеты атомных кластеров с помощью функционала плотности», однако в ней обсуждаются также и другие аспекты — применимость локального приближения, сравнение с методом конфигурационных взаимодействий и др.

Тема следующей, пятой лекции (Д. Д. Келлинг) «Зонная модель для d- и f-металлов» относится к наиболее интригующим. К сожалению, довольно обширный представленный материал не сопровождается ярким теоретическим обсуждением. Определенное «сглаживание» острых углов, по-видимому, должно вызвать у читателя ощущение благополучия, которого, несмотря на значительные результаты, в области f-металлов пока нет. Тем не менее лекция Д. Д. Келлинга весьма информативна, а кроме того, довольно подробно в ней изложены методические вопросы расчета.

За первыми пятью лекциями общего характера следуют лекции, посвященные более частным вопросам. Так, в шестой лекции М. Гупты идет речь о водороде в металлах. Освещены как вопросы экранирования и энергетики отдельной примеси водорода, так и вопросы об электронной структуре стехиометрических и нестехиометрических гидридов. Уделено внимание также сверхпроводимости гидридов. В седьмой лекции (В. Вебер) описывается применение метода сильной связи для расчета фононных спектров переходных металлов.

Восьмая и девятая лекции содержат весьма важный и новый материал, касающийся расчетов электронной структуры неупорядоченных систем. Авторами их являются сотрудники Бристольской группы (Б. Дьорффи, Дж. М. Стокс и др.), внесшей наибольший вклад в развитие метода ККР - ПКП, а также Г. Винтер из ФРГ. После краткого обзора теории многократного рассеяния и формализмов средней t-матрицы и когерентного потенциала (ПКП) следует подробное изложение техники ККР - ПКП в ее наиболее оптимальном варианте (так называемое «быстрое ПКП») и полученных результатов. Совершенно свежий материал содержится в десятой лекции — зонные расчеты для ферромагнетиков при $T \neq 0$ методом ПКП. Здесь также

обсуждается теория Стонера — Вольфарта при $T \neq 0$, теория спинового функционала плотности с непараллельными спинами.

К сожалению, вместо девятой лекции А. Р. Вильямса и Дж. Конноли «Расчет фазовых диаграмм из первых принципов», состоящей из 5 частей, опубликована лишь краткая заметка (12 с.). Тем не менее даже в таком виде она представляет интерес.

Наиболее ценным в одиннадцатой лекции (Дж. А. Вильсон «Связь между электронной конфигурацией, кристаллической и зонной структурой», является, по-видимому, указатель и библиография (247 ссылок). Двенадцатая лекция Р. Дж. Дерхэма посвящена электронной спектроскопии металлов, тринадцатая лекция Ф. Хейне — методу рекурсий Хайдока. Наконец, завершают книгу две коротких лекции: Н. Бир и Д. Д. Петтифор «Метод рекурсий и оценка плотности состояний» и «Компьютерные эксперименты и аморфные переходные металлы».

В целом можно сказать, что рецензируемый сборник, во-первых, достаточно представителен по составу авторов, во-вторых, посвящен в основном весьма актуальным вопросам, и, в-третьих, большинство лекций довольно удачные. Знакомство с этими материалами было бы весьма полезно всем, занимающимся расчетами электронной структуры и связанными с ними вопросами.

И. И. Мазин

532.517.4(049.3)