

538.915(049.3)

**ЛЕКЦИИ ПО ПРИМЕНЕНИЮ ТЕОРИИ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ  
В РАСЧЕТАХ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

**Moertig I., Mrosan E., Ziesche P.** *Multiple Scattering Theory of Point Defects of Metals: Electronic Properties.* — Leipzig: Teubner, 1987. — 220 p. — (Teubner Texte zur Physik. Bd 11).

Рецензируемая книга представляет собой 11-й том издающейся в ГДР серии «Тойбнеровские лекции по физике». Она написана сотрудниками «Дрезденской группы по электронной теории» при техническом университете Дрездена, давно и активно занимающимися расчетами электронной структуры и электронных свойств твердых тел. Это наложило свой отпечаток на книгу: чувствуется практический подход, авторы не пренебрегают изложением технических деталей, методик и т. п.

Надо сказать, что расчеты электронной структуры неупорядоченных тел и кристаллов с примесями в последнее время развиваются очень активно. Необходимость в книге, последовательно излагающей теоретические основы подобных расчетов, уже назрела. До последнего времени имелось только одно издание, посвященное этим вопросам, — известная книга Эренрайха и Шварца (1976 г.), переведенная на русский язык в 1979 г. Однако в этой книге изложение ведется преимущественно с точки зрения теории сильной связи, а не с точки зрения более популярной в настоящее время и, вероятно, более перспективной теории многократного рассеяния.

Общая структура книги следующая. Первые две главы — вводные, в них трактуются общие понятия зонной теории: метод функционала плотности, маффин-тин-приближение для потенциала, сверхъядейки и т. д. Следует отметить, впрочем, что по своему смыслу эти лекции рассчитаны на специалистов, хорошо знакомых с указанными вопросами. Наиболее ценными для читателя, по-видимому, являются следующие две главы — третья и четвертая, посвященные теории рассеяния на уединенном потенциале и на системе рассеивающих потенциалов. Несмотря на краткость, авторам удалось в этих главах довольно последовательно изложить важнейшие уравнения теории многократного рассеяния.

Пятая, шестая и седьмая главы образуют как бы отдельный комплекс, мало связанный с предыдущей частью. В них авторы рассказывают о методах расчета конкретных физических величин или эффектов, а именно эффекта де Гааза — ван Альфена, остаточного сопротивления и термо-э. д. с., магнитосопротивления и постоянной Холла. Безусловно, выбор именно этих тем определяется только областью научных интересов авторов — Мёртиг и Мрозана, а не особой их важностью с точки зрения применения теории многократного рассеяния. Впрочем, изложение методов решения уравнения Больцмана в кристаллах, в частности метод ферми-гармоник (Fermi surface harmonics), представляет более широкий интерес.

Несколько странным кажется выделение некоторых технических вопросов в отдельную главу — восьмую, в которой всего 8 страниц. Фактически она состоит из описания модельного потенциала точечного дефекта, которое было бы более уместно во вводной части, и изложение тетраэдронного метода интегрирования по зоне Бриллюэна, который, правда, был разработан впервые в дрезденской группе, но сегодня настолько широко распространен, что хорошо знаком каждому физическому, занимающемуся расчетами электронной структуры. Остальные технические вопросы (некоторые из них, впрочем, тоже кажутся излишними в подобном курсе лекций) вынесены в приложение.

Наконец, в последней главе излагаются конкретные количественные результаты, полученные дрезденской группой.

Книга снабжена довольно подробной библиографией — более трехсот названий.

В целом впечатление от книги Мёртиг, Мрозана и Цише примерно следующее: книга не лишена недостатков, это в первую очередь — непоследовательность в подборе материала. В то же время в ней можно найти неплохое изложение ряда вопросов, отсутствующих в монографиях, доступных советскому (да, вероятно, и зарубежному) читателю. Она будет полезна тем, кто занимается теорией многократного рассеяния в приложении к неупорядоченным твердым телам и примесям и расчетами транспортных свойств твердых тел.

*И. И. Мазин*