

538.915(049.3)

**ШКОЛА ПО ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

*Electronic Band Structure and Its Applications*/Ed. M. Yussouff. — Berlin; Heidelberg; New York; London; Paris; Tokyo: Springer-Verlag, 1987. — 440 p.

Рецензируемая книга представляет собой сборник лекций и докладов, прочитанных на международной школе по электронной структуре твердых тел, состоявшейся в Индии осенью 1986 г. Собранные материалы неоднородны по качеству. Некоторые лекции представляют собой обзоры деятельности известных западных групп за несколько лет, некоторые — эссе по актуальным вопросам зонной теории, некоторые — просто научные доклады. В связи с этим некоторым материалам будет уделено большее внимание в рецензии, некоторым — меньшее, а некоторые будут просто перечислены.

Лекция О. К. Андерсена, О. Йепсена и М. Соба называется «Линейные методы расчета зонной структуры». Она занимает почти 60 стр. и посвящена изложению современного состояния метода линейных МТ-орбиталей (ЛМТО), включая теорию преобразований МТ-орбиталей и метод ЛМТО-сильной связи. Для тех, кто знаком с известной триестской лекцией О. К. Андерсена (Andersen O. K., Jepsen O., Giotz 1985) заметим, что данная лекция является, фактически, переработкой триестской. Хотя за прошедшие два года идеиное содержание не слишком изменилось, созрело более четкое и ясное изложение идеологии современного метода ЛМТО. Изучающим этот метод можно рекомендовать на сегодняшний день именно эту лекцию.

Лекция С. Г. Луи представляет собой обзор обширной деятельности автора и М. С. Хибертсена по расчету квазичастичных спектров в полупроводниках «из первых принципов», в том числе по изучению поправок к теории функционала плотности. В этот обзор вошли в той или иной мере все работы этой группы, кроме последних работ (1987 г.) по расчету диэлектрической проницаемости полупроводников.

Третья лекция обзорного характера — Р. Целлера. В ней рассказано о результатах, достигнутых Дедерихсом, Целлером и другими представителями Юлихского института физики твердого тела в расчетах электронной структуры примесей, особенно магнитных, в переходных металлах. Отметим, что в этой лекции, как и в предыдущей, очень мало сказано о технике соответствующих расчетов — акцент сделан на результативной части работы.

Если названные выше лекции являются, как уже сказано, обзорами работ соответствующих групп, то лекции Р. Хайдока («Метод рекурсий»), А. Бэнзила («Современная теория неупорядоченных сплавов») и Х. Неддермайера («Фотоэмиссия в металлах») значительно ближе к лекциям в прямом смысле этого слова, т. е. преследуют скорее образовательные цели — дать понятие о предмете человеку, не являющемуся специалистом буквально в данной области. Достаточно краткие (10—30 стр.), но вполне содержательные, эти лекции весьма интересны для чтения.

Особо хочется выделить доклад У. Е. Пиккетта «Связь теории функционала плотности и проблемы тяжелых фермионов». Известный теоретик и одновременно хороший специалист в области зонных расчетов, он дает ясно понять, что же может и чего не может дать современная техника одноэлектронных расчетов для понимания и описания тяжелофермионных систем. Эта статья, или, скорее, эссе, будет интересна и полезна более широкому кругу читателей — как «зонникам», занимающимся расчетами «из первых принципов», так и «абстрактным теоретикам», занимающимся модельными теориями тяжелофермионных систем. На мой взгляд, было бы полезно перевести эту статью.

Перечислю еще несколько статей, более специального характера: М. Юссуфф — «Быстрый самосогласованный ККР метод». О. Гуннарссон, Р. О. Джоунс, К. Шёнхаммер — «Формализм функционала плотности:  $V_{xc}$ , разрывы, приближение локальной плотности». С. Деманжа — «Водород в переходных металлах». С. К. Сикка и В. Виджаякумар — «Изменения электронной структуры при высоких давлениях». Б. Л. Дьюрфи и др. — «Магнетизм и химический порядок в сплавах». Дж. Б. Соколофф — «Аномальная электронная структура и транспортные свойства квазикристаллов». В сборнике имеется еще ряд статей, представляющих, по-видимому, несколько меньший интерес.

*И. И. Мазин*