

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., Glotzel D.//*Highlights of Condensed Matter*. — New York: North Holland, 1985) заметим, что данная лекция является, фактически, переработкой триестской. Хотя за прошедшие два года идейное 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 «зонщикам», 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. Дьорффи 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*