

538.91 (04973)

МНОГОАТОМНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Many-Atom Interactions in Solids.— Proceedings of the International Workshop. Pajulahti, Finland, June 5—9, 1989/Eds. R. M. Nieminen, M. J. Puska, M. J. Mauninen.— Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1990.— 320 p.— (Springer Proceedings in Physics. V. 48).

В последнее время широкое распространение получили микроскопические методы расчета полной энергии и межатомных взаимодействий в твердых телах. Методы эти используются для изучения свойств различного типа дефектов, поверхностей, низкосимметричных конфигураций атомов в кристаллах и т. д. В большинстве своем эти исследования основаны на применении методов компьютерной симуляции, таких, как молекулярная динамика, метод Монте-Карло, метод температурного обжига. До недавнего времени такие расчеты проводились в основном с использованием феноменологических парных потенциалов взаимодействия между атомами и чаще всего с использованием потенциала Леннарда — Джонса. Этот потенциал достаточно хорошо описывает свойства инертных газов,

© Е. Г. Максимов 1991

но он плохо приспособлен для описания металлических и полупроводниковых систем. В последнее время появился целый ряд микроскопических подходов к определению парных и многоатомных потенциалов, пригодных для рассмотрения и металлических, и валентных полупроводниковых систем. Во-первых, это метод погруженного атома, основанный на рассмотрении поведения одиночного атома и пары атомов, помещенных в однородный электронный газ. Далее можно отметить метод эффективной среды, позволяющий записать полную энергию системы в виде адиабатного вклада и многоатомных, вычисляемых с учетом реального распределения электронной плотности для идеального кристалла. Существует и целый ряд других как чисто микроскопических, так и феноменологических подходов к конструированию межатомных взаимодействий.

В книге опубликованы материалы рабочего симпозиума, в котором приняли участие наиболее активно работающие в этой области исследователи. Опубликовано около тридцати обзоров, посвященных как общим вопросам построения межатомных потенциалов и их использования в исследовании статистики и динамики решетки кристаллов, так и ряду конкретных проблем, таких, как реконструкция поверхности и динамику молекулярной лучевой эпитаксии. Материалы книги разделены на 4 раздела. 1-й раздел содержит общие обзоры проблемы многоатомных взаимодействий, во 2-м разделе помещены материалы, относящиеся к металлам, в 3-м — обзоры по многоатомным взаимодействиям в полупроводниках. 4-й раздел содержит обзоры по расчетам поверхностных явлений.

Е. Г. Максимов