

Эти выражения все еще содержат неизвестный параметр обрезания k_c . Он определяется из условия минимальности корреляционной энергии. Отсюда следует $\beta = 0,353 r_s^{1/2}$. Тогда равенства (1.46) и (1.47) приводят вместе к корреляционной энергии

$$E_c = -(0,019 - 0,0003 r_s) R_y. \quad (1.48)$$

Это значение можно улучшить, включив описывающий взаимодействие член из (ч. I.12.8), которым мы пренебрегли в (1.43).

Существуют другие методы вычисления корреляционной энергии, методы, связанные с общей проблемой описания многочастичных систем со взаимодействием. Рассматривать эту проблему здесь дальше мы не можем. Отсылаем читателя к изложению Пайнса [27, 101.1] и к рассмотрению электронного газа в [36—42]. Относительно вклада решетки, в частности, приближения Вигнера — Зейтца см. статью Вигнера и Зейтца в [101.1] и приведенные там ссылки. По поводу связи между кристаллической структурой и когезией с использованием теории псевдопотенциала и, следовательно, более современного состояния развития этих областей, также связанных с результатами последнего параграфа, отсылаем читателя к обзорной статье Хейне и Уэйра в [101.24].

В. ЛОКАЛЬНОЕ И НЕЛОКАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ В НЕИСКАЖЕННЫХ РЕШЕТКАХ

§ 7. Введение

Одноэлектронное приближение зонной модели соответствует МО-приближению в теории химической связи. Блоховские функции простираются на всю решетку; каждый электрон делокализован. С далеко идущими применениями этой модели мы уже встречались в предшествующих главах *).

В этом разделе ставится вопрос, при каких условиях, имея дело с однородным твердым телом бесконечной протяженности, целесообразно принять локальное описание или, иначе, когда более уместно пользоваться описанием, подобным VB-методу, вместо описания в терминах зонной модели?

В зонной теории сделано три важных предположения:

- 1) строгая периодичность решетки;
- 2) замена фактического межэлектронного взаимодействия на усредненное взаимодействие (ч. I.3.20) приближения Хартри — Фока;
- 3) пренебрежение колебаниями решетки при предположении, что их можно учесть позднее по теории возмущений (слабая электрон-фононная связь).

Ограничение *периодическими решетками* является необходимым, чтобы вообще можно было ввести вектор $\mathbf{k}$ и, тем самым, делока-

*) См. ч. I, II. (Примеч. пер.)