

TERRY LOUCKS: *Augmented Plane Wave Method, A Guide to Performing Electronic Structure Calculations*. W. A. Benjamin, Inc., New York - Amsterdam, 1967. *Frontiers in Physics Series* (David Pines, Editor) \$ 9.00.

Kirja on kahdessakin mielessä tyyppiesimerkki fysiikan nykyisestä kehitysvaiheesta. Ensinnäkin se on osoitus äärimmäisestä erikoistumisesta. Toiseksi koko sen mielekkyys perustuu fysiikan valtakunnassa kukoistavaan ja yhä voimistuvaan tietokonekulttuuriin. Kysymyksessä on oikeastaan vai eräs yhden fysikaalisen ongelman – kiinteän olomuodon elektronirakenteen – käsittelyssä käytettävä likimääräinen laskentamenetelmä, jonka selvittelyyn tässä syvennytään. Ymmärrettäköön kuitenkin, että hyvin laaja joukko erilaisia solid state -probleemoja palautuu viimekädessä tähän kysymykseen tai ainakin sivuaa sitä, mikä jo hyvinkin motivoi kirjan julkaisemisen. Käsiteltävä ongelma on laskennallisesti niin vaikea hallita, että vielä kymmenisen vuotta sitten oli joka ainut sitä koskeva, radikaalisestikin likimääräinen, laskusuoritus inhimillisen kärsivällisyyden mestarinäyte. Siksi on ymmärrettävää, että APW-menetelmä on jo useita vuosia ollut täysikäinen ja kuitenkin siitä on vasta viime aikoina saatu sikiämään mielekästä fysiikkaa – tietokonehedelmöityksen tuloksena.

Suppean aiheensa kirja käsittelee varsin täydellisesti. Lukija saa selvän kuvan APW-menetelmän periaatteellisesta taustasta, siihen sisältyvien approksimaatioiden oikeutuksesta sekä menetelmän suhteesta rinnakkaisiin käsittelytapoihin. Myös menetelmän relativistinen muoto esitellään. Sarjan vakiintuneeseen tapaan huomattavan osan kirjaa muodostaa eripainoskokoelma, johon on valittu aiheen kannalta keskeisimmät julkaisut. Tässäkin tapauksessa se antaa läpileikkauksen sekä menetelmän historiallisista vaiheista että sen nykyisistä käyttömahdollisuuksista.

Niille, jotka joutuvat turvautumaan APW-menetelmään, tämä kirja – erityisesti sen luku »Practical Aspects ... » ja liitteissä esitelty kokoelma tietokoneohjelmia – on varmasti hyvin hyödyllinen. Tuntuu siltä, että kirja tällaisena johtaa aidan yli varsin matalasta kohdasta opastaen yrittäjän minimiajassa ja -vaivalla suoraan tietokoneiden temmelyskentälle ruokkimaan niitä omilla ongelmillaan. Tämä on ilmeisesti kirjan ainoa todellinen funktio. Sen poikkeuksellisen seikkaperäisesti yksityiskohtiin uppoutuva ote on siksi täysin oikeaan osuva. Menetelmää tarvitsematon käyttänee aikansa paremmin toisenlaisten kirjojen parissa.

KAARLE KURKI-SUONIO