**Рубан, Андрей Владимирович.**

## Электронная структура и межатомное взаимодействие в интерметаллиде Ni3Al : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Москва, 1984. - 131 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Рубан, Андрей Владимирович

ВВЕДЕНИЕ.

1. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙКТУРЫ И ИНШ'РАЛЬНЫХ ПО СПЕКТРУ СВОЙСТВ.

1.1. Первопринципные методы.

1.2. Метод поевдопотенциала.

2. ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ Hibk<¿.

МЕТОД ЛМТО.

2.1. Двухуровневая охема оамоооглаоования в ЛМТО методе для соединений.

2.2. Особенности электронного строения интерметаллида Nibkt

2.3. Энтальпия Ь.бразования.

3. МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В А/сьА£.

МЕТОД ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА.

3.1. Расчет полной энергии № , А£ и №3Ае

3.2. Ковалентные эффекты в фазах со структурой U-2,

3.3. Динамика решетки и энтропия образования Мс3 ДС

4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ ПРИМЕСИ ПО ПОДРЕШЕТКАМ УПОРЯДОЧЕННЫХ ФАЗ С ДВУМЯ ТИПАМИ УЗЛОВ.

4.1. Применение метода статических концентрационных волн для легированных фаз со структурой

4.2. Метод априорного определения распределения атомов примеси в почти упорядоченных фазах с двумя типами узлов.

4.3. Полная энергия, энергия упорядочения и размещение атомов примеси в WцАе.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДО.ЮЗ