**Елфимов, Илья Сергеевич.**

## Исследование эффектов орбитального, зарядового и спинового упорядочений в соединениях переходных металлов первопринципным методом LDA+U : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.21. - Екатеринбург, 1999. - 107 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Елфимов, Илья Сергеевич

Оглавление

Введение

Глава 1. Метод расчета электронной структуры твердых тел

1.1 Функционал электронной плотности

1.1.1 Обменно-корреляционный функционал и приближение локальной электронной плотности

1.2 Метод LMTO

1.2.1 Определение огибающей базисной функции

1.2.2 МТ-орбитали, потенциальные параметры и функции

1.2.3 Линейные МТ-орбитали

1.2.4 Гамильтониан и матрица перекрывания

1.2.5 Плотности состояний и полная энергия

1.3 Метод LDA+U

Глава 2. Переход металл-изолятор в FeSi

2.1 Зонная структура

2.2 Магнитная восприимчивость и электронная теплоемкость

Глава 3. Зарядовое упорядочение в Fe3Ü4

3.1 Модель Верве

3.2 Проблема самодействия в LSD А

3.3 Результаты зонного расчета

Глава 4. Орбитальное упорядочение в перовскитах переходных металлов

4.1 Магнетизм и орбитальное вырождение

4.2 Расчет зонной структуры Рг1\_жСажМпОз

4.3 Эффект аномального рассеяния рентгеновского излучения

и орбитальное упорядочение

Глава 5. Магнитные свойства Са(М^)УпС>2п+1

5.1 Результаты ЬБА+и расчета

5.2 Результаты расчета параметров обменного взаимодействия

Заключение