**Постников, Андрей Викторович.**

## Расчет электронной структуры примесей 3d-элементов в алюминии и переходных металлах : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Свердловск, 1985. - 225 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Постников, Андрей Викторович

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

ПРИМЕСЕЙ В МЕТАЛЛАХ.

1.1. Виртуальное связанное состояние

1.2. Модель Андерсона.

1.3. Взаимодействие пары примесей в металле

1.4. Учет орбитального вырождения в модели Андерсона.

ГЛАВА 2. НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ

СТРУКТУРЫ ПРИМЕСНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОВ

2.1. Общий метод решения. Функционал локальной спиновой плотности.

2.2. Метод функций Грина в формализме рассеянных волн.

2.3. Кластерный метод рассеянных волн с к -зависящими граничными условиями #

2.4. Кластер в электронном газе.

ГЛАВА 3. КЛАСТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

МЕТАЛЛОВ.

3.1. Построение потенциала кластера

3.2. Самосогласованно по зарядовой конфигурации.

3.3. Электронная структура алюминия.

3.4. Переходные металлы: влияние размера кластера.«

3.5. Переходные металлы: сравнение результатов двух схем кластерного расчета

3.6. Бинарные сплавы: оценка зарядового переноса. • «

ГЛАВА 4. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ПРИМЕСНЫХ СИСТЕМ

БЕЗ УЧЕТА СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ.

4.1. Электронная структура примесей в алюминии.

4.2. Критерий существования локальных магнитных моментов примесей в простых металлах

4.3. Примеси в благородных металлах.

4.4. Примеси в переходных металлах.

4.5. Локальная восприимчивость и критерий существования локальных магнитных моментов примесей в переходных металлах.

ГЛАВА 5. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ

ПРИМЕСЕЙ В МЕТАЛЛАХ.

5.1. Влияние взаимодействия на локальную плотность состояний

5.2. Критерий существования локальных магнитных моментов пары примесей.

5.3. Вычисление межатомного обменного интеграла пары примесей

ГЛАВА 6. ШИН-ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ РАСЧЕТЫ ПРИМЕСНЫХ СИСТЕМ

6.1. Магнитные примеси в меди.

6.2. Примеси Мп и Fe в Ti.

6.3. Примесь железа в Ad и 5d -металлах.

6.4. Примеси в Ферромагнетиках.