**Болецкая, Татьяна Константиновна.**

## Теоретическое исследование электронной структуры интерметаллического соединения никелид титана : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Томск, 1984. - 162 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Болецкая, Татьяна Константиновна

ВВЕДЕНИЕ.

Гяава I. ПРОБЛЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКШЫ

НИКЕЛИДА. ТИТАНА.

§ I. Модели, предполагающие электронную природу фазовых превращений в никелиде титана.

§ 2. Экспериментальные и теоретические исследования электронной энергетической структуры никелида титана

§ 3. Влияние не МТ добавок к щшсталлическому потенциалу на зонную структуру переходных металлов.

§ 4. Расчеты оптических и рентгеновских свойств d «металлов и их соединений

Гиава П. ЭЛЕКТРОННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ПЛОТНОСТЬ

СОСТОЯНИЙ НИКЕЛИДА. ТИТАНА.

§ 5. Построение одноэлектронного кристаллического потенциала в МТ приближении.

§ 6. Расчет одноэлектронных 1фисталлических плотности и потенциала в МТ приближении

§ 7. Расчет электронного энергетического спектра и плотности состояний.

§ 8. Влияние анизотропии одноэлектронного кристаллического потенциала на зонную структуру никелида. титана.

Глава Ш. РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В МЕТОДЕ ККР.

ПРИМЕНЕНИЕ К NlTl

§ 9. Метод парциальных волн для рассеивателя,не обладающего сферической симметрией.

§ 10. Обобщенный метод парциальных волн для совокупности неперещшвающихся МТ потенциалов.

§ II. Использование обобщенного метода парциальных волн для расчета электронных волновых функций NiTl

Глава 1У. ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И РЕНТГЕНОВСКИЕ

ЭМИССИОННЫЕ СПЕКТРЫ НИКЕЛИДА ТИТАНА,

§ 12. Предварительные замечания

§ 13. Расчет вероятностей электронных переходов.

§ 14. Средние значения импульса в одноэлектронных состояниях.