**Сиротюк, Степан Васильевич.**

## Априорные псевдопотенциалы в методе полностью ортогонализованных плоских волн : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Львов, 1984. - 148 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Сиротюк, Степан Васильевич

ВВЕДЕНИЕ.

I. МЕТОД ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛОВ В ТЕОРИИ МЕТАЛЛОВ.II

1.1. Современные методы расчета зонного энергетического спектра твердых тел.II

1.2. Метод априорных атомных псевдопотенциалов

1.3. Метод модельных псевдопотенциалов.

П. МЕТОД ПОЛНОСТЬЮ 0РТ0Г0НАЛИ30ВАННЫХ ПЛОСКИХ ВОЛН

2.1. Базис ПОПВ.

2.2. Анализ псевдопотенциалов простых металлов, построенных на базисе ПОПВ.

2.3. Псевдопотенциал переходного металла в методе

ПОПВ.

2.4. Статическая диэлектрическая функция экранирования с явным учетом $-<& гибридизации

Ш. РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.

3.1. Самосогласованный потенциал кристалла в методе

ПОПВ.

3.2. Эффективная валентность ионов переходных металлов.

3.3. Исследование перераспределения плотности электронов.

3.4. Расчет собственных значений энергии электронов, находящихся в связанных состояниях

3.5. Диагональный матричный элемент псевдопотенциала . .94 1У. КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.

4.1. Анализ различных вкладов в недиагональные матричные элементы экранированных псевдопотенциалов переходных металлов.

4.2. Исследование нелокальных свойств псевдопотенциалов переходных металлов

4.3. Электросопротивление жидких переходных металлов

4.4. Электронная составляющая теплопроводности переходных металлов

4.5. Оценки параметров зонной структуры переходных металлов.

У. КЛАССИФИКАЦИЯ МЕТАЛЛОВ В МЕТОДЕ ПОПВ.

5.1. Критерий применимости приближения компактных внутренних оболочек в теории псевдопотенциалов

5.2. Структура модельных псевдопотенциалов металлов

5.3. Анализ применимости приближения компактных внутренних оболочек для редкоземельных металлов

ВЫВОДЫ.