**Плотников, Николай Александрович.**

## Электронная структура, рентгеновские эмиссионные и оптические свойства интерметаллических соединений скандия со структурой В2 : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Киев, 1985. - 126 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Плотников, Николай Александрович

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА I. ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ СО СТРУКТУРОЙ

ТИПА && (обзор)

ГЛАВА 2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ, РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ

2.1. Основные уравнения метода ЛППВ

2.2. Построение кристаллического потенциала

• структур с базисом

2.3. Проблема собственных значений и собственных векторов

2.4. Методы интерполяции и интегрирования в 4 - пространстве

2.5. Самосогласованное построение электронной плотности

2.6. Интенсивность рентгеновской эмиссии

2.7. Вычисление межзонной плотности состояний и оптической проводимости

ГЛАВА 3. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ ТИПА & &

3.1. Влияние эффектов обмена и корреляции на зонную структуру

3.2. Зонная структура соединений

Sc.Cc

Sc. А/с , Sc Си

3.3. Зонная структура соединений

ScM , ScPJ , bfy

3.4. Зонная структура соединений ^^ и

ГЛАВА 4. РЕНТГЕНОВСКИЕ ЭМИССИОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

СО СТРУКТУРОЙ ТИПА Csfy

4.1. Рентгеновские эмиссионные спектры

4.2. Оптические спектры