**Мирзоев, Александр Аминулаевич.**
Моделирование атомной и электронной структуры топологически неупорядоченных систем в методе сильной связи : диссертация ... доктора физико-математических наук : 02.00.04. - Челябинск, 1999. - 248 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Мирзоев, Александр Аминулаевич

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ.

1.1 Теория фужционала локальной плотности.

1.2. Методы расчетов электронной структуры конденсированных сред.

1.2.1 Выбор базиса.

1.2.2 Метод псевдопотенциала.

1.2.3. Метод сильной связи.

1.2.4 Ячеечные методы (методы парциальных волн).

1.3. Проблема самосогласования и моделирование неупорядоченных конденсированных сред.

1.3.1. Проблема самосогласования.

1.3.2 Метод Кара- Паринелло.

1.3.3. Моделирование атомной и электронной структуры конденсированных сред методом сильной связи.

1.3.4. Упрощенные методы «ab initio».

1.4 Теория структурного упорядочения бинарных систем.

1.4.1 Приближение среднего поля.

1.4.2. Методы учета корреляций.

1.4.3. Модель центрального атома.

1.4.4.Методы кластерных разложений.

ВЫВОДЫ.

ГЛАВА 2. РАСЧЕТ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ФУНКЦИИ ГРИНА.

2.1. Метод функции Грина жидкого металла в приближении коллективных переменных.

2.1.1. Основные уравнения метода.

2.1.2 Расчет плотности состояний.

2.2. Применение функций Грина для описания парамагнитная восприимчивость жидких щелочных металлов вблизи перехода металл-неметалл в модели Хаббарда.

2.2.1. Электронный спектр в модели Хаббарда.

2.2.2. Парамагнитная восприимчивость в модели Хаббарда.

2.2.3.Магнитная восприимчивость жидкого цезия.

ВЫВОДЫ

ГЛАВА 3. ПОСТРОЕНИЕ И АНАЛИЗ КОМПЬЮТЕРНЫХ СТРУКТУРНЫХ МОДЕЛЕЙ: ПРИМЕНЕНИЕ К РАСПЛАВАМ ЦЕЗИЯ.

3.1. Методы компьютерного моделирования структуры.

3.1.1 .Метод Монте-Карло.

3.1.2.Метод молекулярной динамики.

3.2. Построение компьютерных моделей структуры расплавов по данным дифракционных экспериментов.

3.2.1. Обратный метод Монте-Карло.

3.2.2. Силовой алгоритм.

3.2.3.Алгоритмы Шоммерса и Реатто.

3.3. Исследование структуры неупорядоченных систем методом многогранников Вороного.

3.4. Построение и исследование структуры расплавов цезия во всем температурном интервале существования жидкой фазы методами компьютерного моделирования.

3.4.1. Построение модели атомной структуры.

3.4.2. Статистико-геометрический анализ моделей методами многогранников Вороного.

3.4.3. Применение многогранников Вороного для определение параметров ближнего порядка в расплавах жидкого цезия.

3.4.4. Однозначность моделей структуры жидкого металла, получаемых методом обратного Монте-Карло.

ВЫВОДЫ.

ГЛАВА 4. МЕТОД ЛМТО-РЕКУРСИИ.

4.1 Метод рекурсии в расчетах электронной структуры конденсированных сред.

4.1.1 Электронная структура в системах с нарушенной трансляционной симметрией.

4.1.2 Решение уравнения Шредингера.

4.1.3. Плотность электронных состояний.

3.1.4. Использование метода рекурсии для расчета энергии межатомной связи в конденсированных системах.

4.2.Применение метода рекурсии для расчета колебательных возбуждений в конденсированных средах.

4.2.1. Коллективные колебания в неупорядоченных системах.

4.2.2. Основы теории колебательных спектров в неупорядоченных системах.

4.2.3. Практика использования метода рекурсии.

4.3 ТЕОРИЯ ЛМТО

4.3.1 Основные идеи метода.

4.3.2 Формализм метода JIMTO.

4.3.3.Метод ЛМТО-рекурсии.

ВЫВОДЫ.

ГЛАВА 5 ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ И АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД МЕТОДАМИ ЛМТО И РЕКУРСИИ.

5.1. Применение метода рекурсии для расчета колебательных спектров расплавов цезия в широком температурном диапазоне.

5.1.2. Исходные данные, методика моделирования структуры.

5.1.3.Расчет фононных спектров и скорости звука жидкого цезия на основе структурных моделей.

5.1.4.Результаты расчета.

5.2 Применение метода рекурсии для моделирования спектров эмиссии графита.

5.3. Плотность электронных состояний, электронные корреляции и переход -металл-неметалл в высокотемпературной околокритической области в жидком цезии.

5.3.1. Ограничение модели свободных электронов.

5.3.2.Расчет методом JIMTO-Рекурсии электронной структуры цезия в жидком состоянии.

5.3.3. Температурная зависимость плотности состояний.

5.3.4.Вычисление электропроводности жидкого цезия методом перколяции.

5 .4.Электронная и атомная структура расплава Li-Si : совместное использование методов анализа структуры и рекурсии.

5.4.1. Расплавы Цинтля.

5.4.2.Методика изучения взаимосвязи электронной структуры и ближнего порядка в расплавах Li-Si.

5.4.3.Изучение атомной структуры расплавов системы Li-Si.

5.4.4. Электронная структура расплавов системы Li-Si.

ВЫВОДЫ.

ГЛАВА 6. МЕТОД СТРУКТУРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ.

6.1. Основные идеи метода.

6.2. Определение парциальных структурных характеристик по данным дифракционного эксперимента.

6.3. Модельное выражение для энергии бинарного сплава.

6.4. Структурное моделирование бинарных расплавов методом Монте-Карло.

6.4.1 Алгоритм.

6.4.2. Результаты тестирования программы.

6.4. Метод вычислений энергии связи.

6.4.1. Вычислений энергии связи атома.

6.4 2. Энергия связи в бинарной системе Li-Si.

6.4.3.Зависимость энергии связи атома от количества атомов в ближайшем окружении.

6.4.4.Зависимость энергии связи атома от локальной плотности.

6.4.5. Зависимость энергии связи атома Si от плотности расположения окружающих атомов Si.

6.4.6. Зависимость энергии связи атома Si от углового расположения атомов Si в ближайшем окружении.

6.5. Результаты моделирования системы Ligo Si2o.

ВЫВОДЫ