**Фарберович, Олег Вениаминович.**

## Электронная структура и физические свойства соединений d- и f- металлов : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07. - Воронеж, 1984. - 284 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Фарберович, Олег Вениаминович

ВВВДЕНИЕ

ГЛАВА I. ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ РАСЧЕТОВ

ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ.i.

§1.1. Основные положения теории функционала плотности

§ 1.2. Приближение локальной плотности. Обмен и корреляция в однородной электронной жидкости

§ 1.3. Релятивистские эффекты в приближении функционала локальной плотности. Скалярно-релятивистское приближение.

§ 1.4. Расчет возбужденных состояний в приближении функционала локальной плотности. Метод переходного состояния Слэтера

§ 1.5. Метод Х^.

§ 1.6. Применение теории функционала локальной плотности к атомам. Расчет поляризуемостей и квантовых дефектов

ГЛАВА П. МЕТОДЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ И ИХ РЕАЛИЗАЦИЯ

§ 2.1. Формализм и реализация методов ОПВ и МОПВ

§ 2.2. Реализация метода ППВ •••••••.

§ 2.3. Комбинированная схема ППВ-ЛКАО

§ 2.4. Самосогласование в зонной теории ••••••••••••

§ 2.5. Реализация самосогласованного релятивистского метода ЛШВ.

ГЛАВА Ш. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПРОСТЫХ, ПЕРЕХОДНЫХ И РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

§ 3.1. Расчет зонной структуры ванадия и ниобия методами ШИВ и ПИВ.

§ 3.2. Зонная структура европия.

§ 3.3. Изучение электронной структуры лития методом

§ 3.4. Влияние ^-приближения на электронную структуру металлов. ПО

§ 3.5. Самосогласованная зонная структура и спектр люминесценции в алюминии

ГЛАВА 1У. ЭЛЕКТРОННАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ

СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ d -МЕТАЛЛОВ С р-ЭЛЕМЕНТАМИ

§4.1. Соединения А^В5.

§ 4.2. Роль d-состояний металла при образовании электронной структуры соединений A%6.

§ 4.3. Электронная структура и фазовые переходы под давлением в соединении CuCi

§ 4.4. Зонная структура и спектральные свойства соединений AgP , AgCl и AgBr

ГЛАВА У. ЭЛЕКТРОННАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ

СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ f-МЕТАЛЛОВ.

§ 5.1. Электронная структура и фазовый переход полупроводник-металл в монохалькогенидах самария.

§ 5.2. Самосогласованная электронная структура и сверхпроводимость в Las . Сравнение с г.ц.к. лантаном

§ 5.3. Самосогласованная релятивистская зонная структура и подавление сверхпроводимости в соединении TmS

§ 5.4. Спин-поляризованная электронная структура и магнитные свойства монохалькогенидов европия

§ 5,5. Электронная структура соединения с промежуточной валентностью SmBg

ГЛАВА У1. СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ f -МЕТАЛЛОВ.

§ 6.1. Метод расчета спектральных свойств соединений редкоземельных: металлов.

§ 6.2. Спектральные свойства гексаборида самария ••••••

§ 6.3. Спектральные свойства монохалькогенидов самария и европия

§ 6.4. Спектральные свойства соединения las

§ 6.5. Рентгеновские ljjj-спектры поглощения в соединениях f -металлов с промежуточной валентностью