**Потеряев, Александр Иванович.**

## Численные расчеты электронной структуры сильно коррелированных 3d соединений: выход за рамки приближения локальной электронной плотности : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Екатеринбург, 1999. - 102 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Потеряев, Александр Иванович

Введение.

Глава 1. Методы расчёта зонной структуры.

1.1 Функционал электронной плотности

1.2 Обменно-корреляционный функционал и приближение локальной электронной плотности.

1.3 Проблемы приближения локальной электронной плотности

1.4 Теории, лежащие за рамками приближения локальной электронной плотности.

Глава 2. ЬБА+и метод.

2.1 Метод ЬБА+и.

2.2 Спектр валентной полосы и электронная структура СиРеОч

Глава 3. Приближение Т-матрицы.

3.1 Теория Т-матрицы.

3.2 Детали расчёта.

3.3 Электронная структура N{0.

Глава 4. Динамическая теория среднего поля.

4.1 Связь между примесной моделью Андерсона и решёточной задачей в б?00.

4.2 Итеративная теория возмущений при половинном заполнении

4.3 Итеративная теория возмущений для произвольного заполнения