**Никифоров, Игорь Яковлевич.**

## Электронная структура твердых тел и её исследование на многокристальных рентгеновских спектрометрах : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07. - Ростов-на-Дону, 1982. - 357 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Никифоров, Игорь Яковлевич

ВВЕДЕНИЕ

1. Глава I. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ

СОСТОЯНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ.

1.1. Плотность электронных состояний

1.2. Экспериментальные методы исследования плотности электронных состояний

1.2.1. Рентгеновская спектроскопия.

1.2.2. Электронная спектроскопия.

1.2.3. Оптическая спектроскопия

1.2.4. Позитронная спектроскопия.

1.2.5. Комптоновское рассеяние

1.2.6. Электронная теплоемкость переходных металлов

1.2.7. Магнитная восприимчивость переходных металлов

1.3. Теоретические методы исследования плотности электронных состояний.

1.3.1. Кристаллический потенциал

1.3.2. Схема применения одноэлектронных методов расчета электронной структуры твердых тел.

1.3.3. Применение одноэлектронных методов к расчету электронной структуры переходных металлов

2. Глава П. ТЕОРИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ МНОГОКРИСТАЛЬНЫХ

СПЕКТРОМЕТРОВ

2.1. Рентгеновские многокристальные спектрометры

2.1.1. Двукристальные спектрометры

2.1.2. Трехкристальные спектрометры

2.1.3. Четырехкристальные спектрометры

2.2. Разрешающая сила рентгеновских многокристальных спектрометров

2.2.1. Форма дифракционного максимума кристалла

2.2.2. Дисперсия многокристального спектрометра

2.2.3. Форш спектрального окна многокристального спектрометра

2.2.4. Влияние вертикальной расходимости на разрешающую силу многокристальных спектрометров

2.3. Нахождение истинного рентгеновского спектра по наблюдаемому

2.3.1. Метод ступеней (столбиков)

2.3.2. Оптимальное исправление

2.3.3. Исправление на симметричное искажение

2.3.4. Выводы

3. Глава Ш. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ

ТЕЛ НА даух И ТРЕЖРИСТАЛЬНЫХ СПЕКТРОМЕТРАХ 100 3.1. Рентгеновские многокристальные спектрометры

3.1.1. Коротковолновый трехкристальный спектрометр

3.1.2. Вакуумный трехкристальный спектрометр

3.1.3. }0стировка трехкристального спектрометра

3.2.0. Рентгеноспектральные исследования на трех и двух-кристальных спектрометрах

3.2.1. Рентгеновские К -спектры элементов группы железа.

3.2.2. РентгеновскиеТ-спектры металлов группы молибдена.

3.2.3. Форма длинноволновых Кс\* -линий элементов от 14 S\ до 19 К.

3.2.4. Исследование тонкой структуры К©<-спектров переходных элементов на трехкристальном спектрометре

3.2.5. Рентгеноспектральные исследования особенностей электронной структуры сверхпроводящих сплавов.

3.3. Исследование кристаллов на трехкристальных спектрометрах

3.3.1. Исследование формы дифракционных максимумов кристаллов-анализаторов.

3.3.2. Исследование сегнетоэлектрических кристаллов.

3.4. Выводы.

4. Глава 1У. ТЕОРИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ ПОЛОС. 178 4.1 Вероятность перехода.

4.1.1. Дипольные и квадрупольные переходы.

4.1.2. Радиальный фактор вероятности перехода.

4.2. Факторы, влияющие на форму рентгеновских полос испускания.

4.3. Сравнение различных методов расчета теоретической формы рентгеновских эмиссионных полос.

4.3.1. Метод свободных электронов.

4.3.2. Метод ячеек.

4.3.3. Метод сильной связи.

4.3.4. Метод присоединенных плоских волн.

4.3.5. Метод ортогонализованных плоских волн ОПВ.

4.3.6. Метод функций Грина.

4.4. Ррименение метода функций Грина к расчету формы. рентгеновских эмиссионных полос (¿-металлов.

4.4.1. Форма полос испускания 3с!-металлов.

4.4.2. Форма рентгеновских полос испускания 4¿-металлов.

4.4.3. Самосогласованные расчеты электронной структуры и формы эмиссионных полос ¿-металлов.

4.4.4. Относительные интенсивности рентгеновских полос.

4.5. Особенности электронной структуры с1-металлов.

4.6. Выводы.

5. Глава У. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ФОРМА РЕНТГЕНОВСКИХ

ПОЛОС ИСПУСКАНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВОВ

5.1. Приближение локального когерентного потенциала.

5.2. Исследование особенностей и сходимости метода ПЛКП

5.3. Исследование электронной структуры неупорядоченных сплавов алюминия с переходными металлами

5.3.1. Электронная структура сплавов Д?-Си

5.3.2. Электронная структура сплавов A£-'Fe.

5.4. Рентгеновские эмиссионные полосы неупорядоченных сплавов

5.4.1. Рентгеновские эмиссионные полосы сплавов At-Cu.

5.4.2. Рентгеновские эмиссионные полосы сплавов Ai-T?e.

5.5. Влияние разупорядочения на ЭЭС сплавов алюминия с переходными металлами

5.6. Выводы