**Миронов, Владимир Сергеевич.**

## Особенности электронного строения кристаллов соединений S, d и f элементов с зарядовым и орбитальным упорядочениями : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Москва, 1984. - 178 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Миронов, Владимир Сергеевич

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР . II

§ I. Локализация и диспропорционирование электрошок плотности в кристаллах

1.1. Переход Вигнера и модель Мотта - Хаббарда

1.2. Упорядочение электронной плотности в соединениях со смешанной валентностью

1.3. Парное диспропорционирование электронов и его модели

§ 2. Низколенащие коллективные возбуждения в зарядово-упорядоченном состоянии

2.1. Особенности коллективных мод в ЗУС I и ЗУС II

2.2. Коллективные возбуждения и параметрическая неустойчивость ЗУС

§ 3. Орбитальное^, и зарядовое упорядочения в системах с орбитальным выроадением

3.1. Структурный ян-теллеровский переход и электронные упорядочения

3.2. Зарядово-орбитальное упорядочение

3.3. Особенности э

§ктрон-решеточного взаимодействия и электронных упорядочений в f-системах

ПГАВА II. ОСОБЕННОСТИ КШСТАШ1ЧЕСК0Й РЕШЕТКИ И ЗАРЯДОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ

§ I. Влияние лигандной подрешетки на зарядовое упорядочение

1.1. Приближение эффективного подл лигандов.

1.2. Учет валентных состояний лигандов.

§ 2. Зарядовое упорядочение в двумерной треугольной решетке. Случай ЗУС II ( 1<0 )

§ 3. Зарядовое упорядочение в двумерной треугольной решетке. Случай ЗУС I ( I >0 ) . 68'

§ 4. Зарядовое упорядочение на поверхностях кристаллов

ГЛАВА III. КОЛЛЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В

ЗАРДЦОВО -УПОРДДОЧЕНЬЩ СИСТЕМАХ

§ I. Низколежащие коллективные электронные возбуждения в ЗУС I

1.1. Основное состояние ЗУС I

1.2. Расчет коллективных спектров вариационным методом.

1.3. Уравнения движения и коллективные возбуждения.

§ 2. Коллективные электронные возбуждения и параметрическая неустойчивость ЗУС I

§ 3. Коллективные возбуждения в зарядово-орбиталь-но упорядоченной системе с орбитальным вырождением.

3.1. Основное состояние

3.2. Коллективные спектры в ЗОУС

§ 4 . Особенности коллективных электронных возбуждений в ЗУС в двумерной треугольной решетке . III нам 17. особенности электронных орбитальных упорядочений в собщинениях с] и f элементов. на

§ I. Орбитальное упорядочение и зонный эффект

Яна - Теллера в кубических кристаллах.

1.1. Модельный гамильтониан.

1.2. "Ферромагнитное" основное состояние .ВД

1.3. "Антиферромагнитное" основное состояние

§ 2. Эффект Яна - Теллера и спин-орбитальное взаимодействие в d -системах . 128'

§ 3. Эффект Яна - Теллера и магнитные свойства

МрОг.

§ 4. Расчет констант электрон-вибронной связи Tq уровней с Ьщ -колебаниями в октаэдрических комплексах актинидов.

ВЫВОДЫ