**Хон, Юрий Андреевич.**

## Исследование характеристик основного состояния 3d-переходных металлов и их сплавов методом функционала электронной плотности : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07. - Томск, 1982. - 211 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Хон, Юрий Андреевич

ВВЕДЕНИЕ

Глава I. ЛОКАЛЬНЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ ПЛОТНОСТИ

§ I. Полная энергия металлов и методика ее вычисления .Iff

§ 2. Локальное приближение .Z¥

§ 3. /77 - t функционалы плотности

§ 4. Параметризованные функционалы плотности SZ а/ Построение параметризованных функционалов . 5~2, б/ Кинетическая энергия электронов в представлении функций Ваннье .во в/ Псевдопотенциальный подход к вычислению полной энергии

Глава П. ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ В ПЕРЕХОДНЫХ

МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

§ I. Энергии взаимодействия атомов в металлах . 8?

§ 2. Вклад непарных взаимодействий в полную энергию

§ 3. Роль объемных вкладов

§ 4. Энергии взаимодействия атомов в сплавах si

Глава Ш. СШГАВЫ НА ОСНОВЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

§ I. Полная энергия сплавов

§ 2. Сплавы с неограниченной растворимостью компонентов . /оо

§ 3. Природа энергии образования и упорядочения сплавов 2>d -переходных металлов . И?

§ 4. Интерметаллические соединения зУ-металлов . izs

§ 5. Диаграммы состояния интерметаллических соединений

Глава 17. ДЕФЕКТЫ В МЕТАЛЛАХ

§ I. Энергия образования вакансии

§ 2. Вакансии в щелочных и переходных металлах без учета релаксации . 1S

§ 3. Энергия релаксации атомов . £6Z.

§ 4. Энергии образования вакансий в щелочных и переходных металлах . £59

§ 5. Поверхностная энергия 3 ^-переходных металлов