**Смирнова, Екатерина Александровна.**

**Особенности электронной структуры и объемные и поверхностные свойства неупорядоченных сплавов Ag-Pd, Al-Zn, Fe-Ni/Cu(001) : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Москва, 1999. - 118 с.**

**Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Смирнова, Екатерина Александровна**

**Оглавление**

**Введение**

**1. Электронная структура и аномалии физических свойств в системах Ag-Pd, Al-Zn, Fe-Ni**

**1.1. Особенности электронной структуры**

**1.2. Результаты исследования физических свойств и электронной структуры неупорядоченных сплавов систем Ag-Pd, Al-Zn, Fe-Ni**

**1.2.1. Система Ag-Pd**

**1.2.2. Система Al-Zn**

**1.2.3. Система Fe-Ni**

**2. Первопринципные методы расчета электронной структуры**

**2.1. Теория функционала плотности**

**2.2. Приближение когерентного потенциала**

**2.3. Метод линеаризованных muffin-tin орбиталей (ЛМТО)**

**2.3.1. Энергия Маделунга неупорядоченных металлических сплавов в ПКП**

**2.3.2. Методика расчета спектральной функции в ЛМТО-ПКП**

**2.3.3. Методика учета распределения Ферми для расчетов электронной структуры при конечных температурах**

**2.4. Метод локально самосогласованной гриновской функции (ЛСГФ)**

**3. Исследование электронной структуры объемных неупорядочен-**

**ных сплавов**

**3.1. Исследования сплавов системы Ag-Pd**

**3.1.1. Поверхность Ферми**

**3.1.2. Электронная структура**

**3.1.3. Термодинамические и кинетические свойства**

**3.2. Исследования сплавов системы Al-Zn**

**3.2.1. Поверхность Ферми**

**3.2.2. Электронная структура и термодинамические свойства**

**4. Исследование поверхностных свойств неупорядоченных сплавов**

**4.1. Метод ЛМТО-ФГ для расчета поверхностных характеристик металлов и сплавов**

**4.2. Поверхностные сегрегации в системе Al-Zn**

**4.3. Магнитные свойства монослоя сплавов системы Fe-Ni на подложке Cu(OOl)**

**Основные результаты и выводы**

**Заключение**

**Литература**