Развитие зонных методов для расчёта электронной структуры реальных веществ

Михаил Аркадьевич Коротин

ИФМ УрО РАН

Хорошо живётся теоретикам-расчётчикам! Берут компьютерную программу, нажимают кнопку, получают «кривульку» и публикуют её (из бесед с экспериментаторами в курилке). Именно об этом – о компьютерных программах и «кривульках» – и пойдёт речь в моём докладе.

Любая зонная программа для расчёта электронной структуры предназначена для теоретического исследования *идеальных* кристаллов. Для того чтобы такую программу использовать для исследования *реальных* веществ, приходится создавать как физические модели «неидеальности» (отличия реальных веществ от идеальных), так и дополнительные компьютерные программы для решения этих физических моделей.

В качестве реальных веществ в докладе будут обсуждаться легированные соединения, в том числе нестехиометрические соединения и соединения *d*- и *f*-металлов, то есть сильно коррелированные и с непренебрежимым спин-орбитальным взаимодействием.

В качестве физической модели – хаотичное расположение примесных атомов в узлах кристаллической решётки.

В качестве способа решения такой модели – приближение когерентного потенциала.

В качестве программы, реализующей приближение когерентного потенциала – наша собственная разработка[[1]](#footnote-1), имеющая Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, основывающаяся на физических принципах формулировки теории динамического среднего поля. Будет представлено, как учитывать сильные *d-d* и *f-f* межэлектронные корреляции и спин-орбитальное взаимодействие *f*-электронов в приближении когерентного потенциала.

И, наконец, обсуждены некоторые экспериментальные «кривульки» с точки зрения решения модели хаотичного расположения примесных атомов (включая вакансии) в узлах кристаллической решётки.

1. М. А. Коротин, Н. А. Скориков, В. М. Зайнуллина и др. Электронная структура нестехиометрических соединений в приближении когерентного потенциала. Письма в ЖЭТФ. -2011. -Т.94, вып.11. -С.884-889. [↑](#footnote-ref-1)