

УДК 537.13.537.734
© 1990

О СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ И НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОМ ХАРАКТЕРЕ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

С. А. Туржевский, А. И. Лихтенштейн, М. И. Кацнельсон

Проведены зонные расчеты зависимости величины локального магнитного момента в ОЦК Fe и ГЦК Ni, а также примесей Mn в Fe и Ni от угла его поворота относительно вектора намагниченности ферромагнитного кристалла. Использовался метод ЛМТО-функций Грина для решения примесной задачи о неколлинеарной магнитной примеси. На основании точного расчета производной энергии по углу отклонения магнитного момента «примеси» анализируется характер обменных взаимодействий в переходных металлах и их разбавленных сплавах. Вопрос о степени локализации магнитного момента и возможности существования двух различных значений момента в ферромагнитной и антиферромагнитной конфигурациях рассматривается в рамках модели Андерсона в магнитной матрице.

Одной из сложных проблем теории магнетизма переходных металлов и их сплавов является исследование степени локализации магнитных моментов различных атомов и характера обменных взаимодействий коллективизированных электронов. Например, известно, что термодинамика ферромагнитного железа хорошо описывается в классической модели Гайзенберга с локализованными магнитными моментами [1]. Тот факт, что зонный ферромагнетик обладает свойствами, присущими системам с локальными спиновыми моментами и гайзенберговской обменной связью (полная энергия E как функция угла поворота момента θ пропорциональна $\cos \theta$, а не, скажем, $\cos \theta/2$, как в модели двойного обмена [2]), нетривиален. Согласно спин-флуктуационной теории [3], он может быть связан с большим вкладом спиновых флуктуаций в высокотемпературные свойства магнитных металлов. Эти локальные флуктуации представляют собой повороты спиновых моментов на данном узле. Развитые в последнее десятилетие спин-флуктуационные теории магнетизма переходных металлов позволили получить качественное объяснение сложного сочетания черт локализованного и коллективизированного поведения магнитных электронов [3]. Сейчас, однако, остро ощущается потребность в создании теории коллективизированного магнетизма, основанной на реальной зонной структуре конкретных веществ. Неэмпирические зонные расчеты в приближении функционала локальной спиновой плотности позволяют проводить количественные исследования электронной структуры и магнитных свойств не только основного ферромагнитного и антиферромагнитного состояния переходных металлов и их соединений, но и возбужденных магнитных конфигураций, связанных с неколлинеарной структурой спиновых моментов [4-7]. В работах [4, 5] было исследовано парамагнитное состояние железа и никеля, спиновый беспорядок моделировался как эффективная неупорядоченная среда в приближении когерентного потенциала. При этом получено, что в таком расчете магнитный момент железа в парамагнитном состоянии лишь незначительно уменьшился по сравнению с основным ферромагнитным состоянием, тогда как в Ni не существует магнитного решения для неупорядоченной спино-

вой конфигурации. Поэтому можно считать металлическое железо магнетиком с хорошо определенным локальным моментом, а никель — практически чисто зонным ферромагнетиком. Однако для более детального изучения степени локализации магнитных моментов в металлах и их сплавах необходимо анализировать зависимость величины локального магнитного момента от угла его поворота относительно спина соседних атомов. Такая задача может быть решена как при использовании методики спиральных зонных расчетов [4, 7], так и в примесном подходе при изучении спиновых отклонений отдельных атомов [6, 8]. Естественно, что анализ локализации магнитных моментов в разбавленных сплавах возможен только в примесной методике. Кроме того, спиновые спирали являются наиболее вероятными спиновыми возбуждениями лишь при низких температурах, тогда как в парамагнитной области, судя по опыту использования спин-флуктуационной теории, существенны локальные спиновые возбуждения. В данной работе исследованы локальные спиновые отклонения в ОЦК Fe и ГЦК Ni, а также для примеси Mn в этих металлах.

Результаты зонных расчетов в методе ЛМТО-функций Грина анализируются с использованием простой модели Андерсона для примеси в ферромагнитном кристалле.

Для изучения степени локализации магнитных моментов в металле рассмотрим ферромагнитный кристалл, в котором локальная спиновая ось на нулевом узле повернута на угол $\delta\varphi$ относительно оси n ($\delta\varphi = \delta\varphi n$). Использование приближения атомных сфер в линеаризованном методе МТ-орбиталей очень удобно для исследования подобных задач. В этом случае можно считать, что спин-поляризованный потенциал с направлением спиновой оси вдоль произвольного вектора e имеет следующую спинорную форму [4]:

$$V(\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r})\hat{l} + V_1(\mathbf{r})e\hat{s},$$

где $\hat{s} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ — матрицы Паули,

$$V_0(\mathbf{r}) = 1/2 [V_{\uparrow}(\mathbf{r}) + V_{\downarrow}(\mathbf{r})], \quad V_1(\mathbf{r}) = 1/2 [V_{\uparrow}(\mathbf{r}) - V_{\downarrow}(\mathbf{r})]. \quad (1)$$

Для нахождения одноэлектронного энергетического спектра кристалла необходимо решать сложную спиновую систему уравнений Кона—Шема [9]

$$\sum_{\beta} [-\Delta\delta_{\alpha\beta} + V_{\alpha\beta}(\mathbf{r})]\psi_{\beta}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Однако можно воспользоваться удобным формализмом метода функций Грина, поскольку потенциал при таком магнитном возбуждении существенно меняется лишь на нулевом узле. Потенциальный параметр в методе ЛМТО-функций Грина [10], соответствующий обратной одноцентровой t -матрице рассеяния, имеет спинорную структуру, аналогичную потенциалу (1)

$$\hat{P}(E) = P_0(E)\hat{l} + P(E)\hat{s}, \quad (3)$$

где $P_0 = 1/2 \text{Sp}_r \hat{P}$, $P = 1/2 \text{Sp} \hat{s}\hat{P}$.

При повороте магнитного момента нулевого узла на угол $\delta\varphi$ от направления вектора намагнитченности ферромагнитного кристалла изменение p -матрицы рассеяния запишется в виде

$$\delta\hat{P}(E) = [\delta\varphi \times P]\hat{s}. \quad (4)$$

Полную T -матрицу рассеяния неколлинеарной спиновой конфигурации кристалла можно определить из решения эффективной «примесной» задачи [10]

$$\hat{T}^{00}(E) = \hat{T}^{00}(E)(I - \delta\hat{P}(E)\hat{T}^{00}(E))^{-1}, \quad (5)$$

где $\hat{T}(E)$ — полная матрица рассеяния ферромагнитного кристалла, которую в ортогональном методе ЛМТО [10] удобно рассчитать через матричные элементы функции Грина

$$G_{LL'}^{ij}(E) = \dot{P}_{iL}^{ij}(E) \bar{T}_{LL'}^{ij}(E) = (1/\Omega) \int dk \sum_n \frac{\psi_{nL}(\mathbf{k}) \psi_{nL'}^*(\mathbf{k})}{E - E_n(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{kR}_{ij}}, \quad (6)$$

где точка означает производную по энергии от потенциальной функции.

Локальный магнитный момент нулевого узла в произвольной спиновой конфигурации определяется через рассчитанную по формуле (5) функцию Грина

$$\mathbf{M} = (-1/\pi) \int_{E_F} d\varepsilon \text{Sp } \sigma \hat{G}(E). \quad (7)$$

С вычислительной точки зрения удобно локальную спиновую ось выделенного атома направлять вдоль Z . Поскольку в методе функционала локальной спиновой плотности обменно-корреляционный потенциал V_{xc} зависит только от полной электронной плотности $n(\mathbf{r})$ и модуля спиновой плотности $|\mathbf{M}(\mathbf{r})|$, можно проводить самосогласованные расчеты только по величине магнитного момента (7), пренебрегая «поперечными» относительно локальной оси Z компонентами матрицы плотности.

Для изучения характера обменных взаимодействий необходимо исследовать зависимость полной энергии кристалла от угла поворота локального момента нулевого узла

$$E_{\text{tot}} = \int_{E_F} dE \varepsilon N(E) - \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \int d\mathbf{r} (\text{Sp}(\hat{\rho} \hat{V}_{xc}) - n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}). \quad (8)$$

Однако весьма сложно рассчитать изменение полной электронной плотности кристалла при возбуждении спинового момента нулевого узла, даже используя приближение большого «кластера» в твердом теле [10]. Существенно более точно можно рассчитать первую производную полной энергии (8) по углу отклонения спинового момента, поскольку, согласно теореме локальных сил [6], она сводится к производной суммы одноэлектронных энергий при фиксированном потенциале

$$\delta E_{\text{tot}} = \int_{E_F} dE \varepsilon \delta N(E) = (1/\pi) \int_{E_F} dE \text{Im Sp} [\delta \hat{\rho}(E) \hat{T}^{00}(E)]. \quad (9)$$

Рассчитывая шпур по спиновым переменным и учитывая выражение (4) для $\delta \hat{\rho}$, получим

$$\frac{\delta E_{\text{tot}}}{\delta \varphi} = (2/\pi) \int_{E_F} dE \text{Im Sp}_L [\mathbf{p}(E) \mathbf{T}^{00}(E)]. \quad (10)$$

Отметим, что для ферромагнитного или антиферромагнитного кристалла $\mathbf{p} = (0 \ 0 \ p_z)$ и $\mathbf{T}^{00} = (0 \ 0 \ T_z^{00})$ коллинеарны и первая производная полной энергии (10) тождественно обращается в нуль. Вторая производная полной энергии по углу отклонения выделенного атома определяет эффективный параметр обменного взаимодействия J_0 , аналитическое выражение для него было получено в [6, 8]. Расчеты параметров J_0 для ферромагнитного состояния переходных металлов и их сплавов были проведены в [6, 11]. Численная производная от выражения (10) для малых отклонений $\delta \varphi$ хорошо совпадает с данными работы [11] и подтверждает правильность полученных в [6] соотношений. Однако для восстановления всей зависимости $E(\theta)$, где $0 \leq \theta \leq \pi$ — конечный угол поворота, и анализа негайзенберговских обменных взаимодействий, необходимо самосогласованно вычислять E'_θ при каждом значении θ .

Были проведены самосогласованные расчеты угловой зависимости величины магнитного момента выделенного узла и первой производной полной энергии по углу отклонения спиновой оси нулевого атома от направления намагничивания ферромагнитного ОЦК железа и ГЦК никеля. Для моделирования разбавленных сплавов MnFe и MnNi про-

дидлись аналогичные расчеты одиночных неколлинеарных (по спину) примесей марганца в данных матрицах. Во всех расчетах использовался обменно-корреляционный потенциал Гуннарсона—Лундквиста [9]. Для

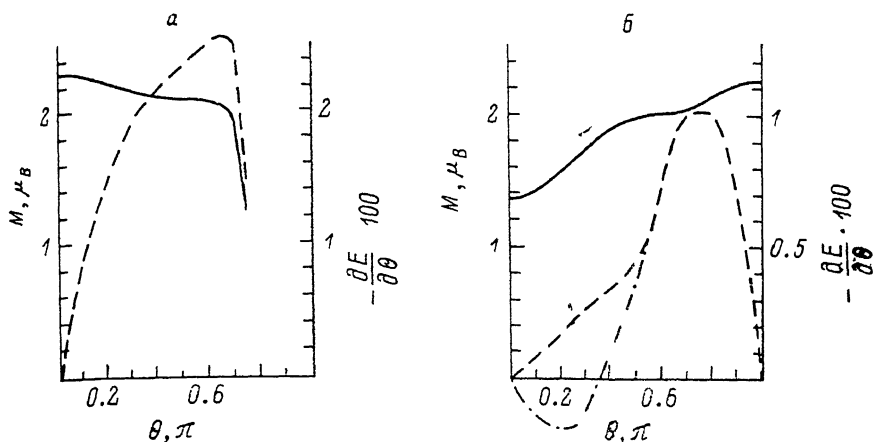


Рис. 1. Локальный магнитный момент и первая производная полной энергии по углу поворота для магнитной примеси в ОЦК Fe.

α — Fe, β — Mn.

определения ферромагнитной функции Грина чистых матриц в методе ЛМТО—ФГ [10, 12] по формуле (6) использовались результаты самосогласованных ЛМТО расчетов с интегрированием по 140 и 89 к-точкам в неприводимой части ОЦК и ГЦК зоны Бриллюэна. Самосогласование «магнитной» примеси проводилось по спиновым заселенностям с точностью

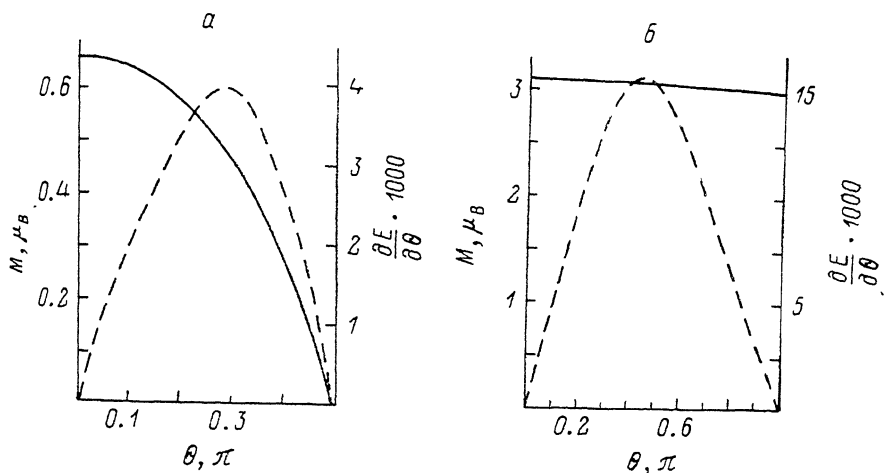


Рис. 2. Локальный магнитный момент и первая производная полной энергии по углу поворота для магнитной примеси в ГЦК Ni.

α — Ni, β — Mn.

до 10^{-2} μ_B . Для неколлинеарного случая примесный спин становится неэквивалентным остальным атомам ферромагнитного кристалла и возможен перенос заряда. Мы использовали простую и весьма эффективную схему учета экранировки одиночной примеси в металле [10, 12], заключающуюся в варьировании радиуса атомной сферы магнитной примеси до полной ее электронной нейтральности.

На рис. 1, 2 приведены результирующие кривые зависимости локального магнитного момента $M(\theta)$ и первой производной полной энергии $\partial E/\partial \theta$ от угла поворота спинового момента относительно ферромагнитной

оси ОЦК Fe и ГЦК Ni. Для локализованной модели Гайзенберга M не зависит от θ , а $\delta E \approx 1 - \cos \theta$ или $\partial E / \partial \theta \approx \sin \theta$. Интересно, что магнитный момент железа не очень сильно меняется вплоть до углов $\theta \approx \pi/2$, а $\partial E / \partial \theta$ примерно совпадает с $\sin \theta$, что говорит об адекватности применения классической модели Гайзенберга к описанию термодинамики ферромагнитного Fe.

Для качественного анализа особенностей электронной структуры неколлинеарных магнитных конфигураций в металлическом Fe, приводящих к «почти» локализованному поведению магнитного момента железа, удобно исследовать локальную спин-поляризованную плотность состояний примеси с магнитным моментом вдоль оси Z . На рис. 3, 4 приведены плотности электронных состояний магнитных систем при различных углах

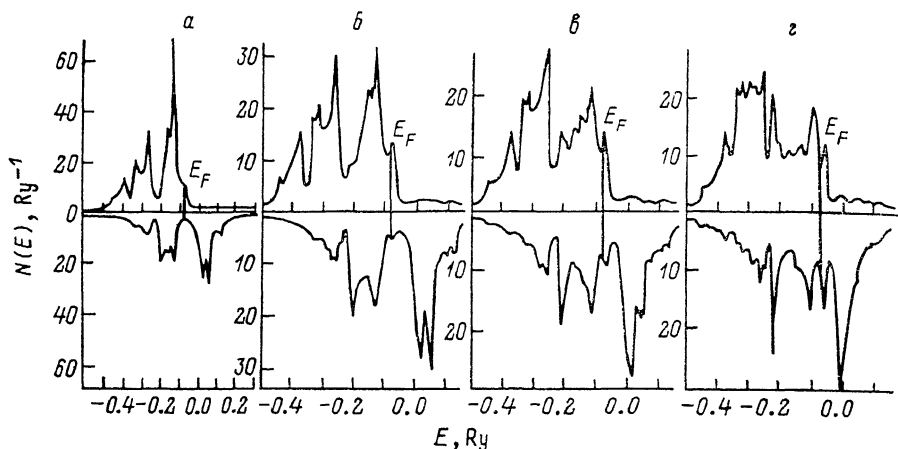


Рис. 3. Плотность электронных состояний системы FeFe при углах поворота $\theta = 0.0$ (а), 0.2π (б), 0.35π (в), 0.5π (г).

поворота. Видно, что для случая чистого железа уровень Ферми попадает в глубокий провал для состояний со спином вниз. Этот провал характерен для ОЦК структуры и связан с расщеплением d -состояний на антисвязывающие (верхний пик $N(E)$) и несвязывающие (средние пики $N(E)$). Именно такое сильное квантовохимическое расщепление одноэлектронных состояний и спиновая раздвижка энергетических зон делают большой «антисвязывающий» пик плотности состояний Fe незаполненным, что приводит к большой величине ферромагнитного момента $\mu_{Fe} \approx 2.25 \mu_B$. Более того, при слабой гибридизации состояний с различными спинами при $\theta < \pi/2$ данный «ОЦК-провал» практически сохраняется и поэтому величина магнитного момента нулевого узла сильно не изменяется. Только при $\theta \geq \pi/2$ начинаются полная перестройка энергетического спектра, образование мощных локальных пиков $N(E)$ со спином вниз вблизи уровня Ферми и резкое падение локального магнитного момента Fe при $\theta \approx 0.7\pi$. В этом же диапазоне углов кривая $\partial E / \partial \theta$ резко отличается от $\sin \theta$ и становится сильным негайзенберговский механизм обмена. При критическом угле $\theta_c \approx 0.75\pi$ исчезает самосогласованное решение и, поскольку в расчетах фиксируется лишь спиновая ось, а не направление магнитного момента, система сама приходит к устойчивому решению, соответствующему $\theta = \pi - \theta_c$, что означает простой переворот примесного спина. В случае более «плавных» спиральных возбуждений в Fe локальный магнитный момент существует вплоть до антиферромагнитной конфигурации $\theta = \pi$ [7].

Для разбавленного сплава MnFe ситуация является весьма неоднозначной. Это связано не только с противоречивыми экспериментальными данными о магнитном поведении [13-16], но и с вычислительными трудностями проведения примесных расчетов при $\theta \approx 0$. Действительно, имеются экспериментальные свидетельства, что в сплаве MnFe с Si часть атомов Mn

имеет ферромагнитную ориентацию по сравнению с намагниченностью железной матрицы, а часть — антиферромагнитную. На рис. 1, б приведены результаты двух самосогласованных расчетов неколлинеарных конфигураций примеси Mn в Fe. Штрихпунктирной линией (отметим, что на этом графике отложено $\partial E/\partial\theta$) даны наши предыдущие расчеты с использованием 30 k-точек в неприводимой части зоны Бриллюэна. Кривая зависимости $M(\theta)$ практически не отличается в двух расчетах, тогда как $\partial E/\partial\theta$ при θ вблизи нуля сильно зависит от точности расчета. Для расчетов с 30 k-точками получились два устойчивых состояния (ферромагнитное и антиферромагнитное), тогда как для 140 k-точек — только антиферромагнитная конфигурация Mn в Fe является устойчивой относительно поворотов магнитного момента ($\partial^2 E/\partial^2\theta > 0$). Такое сложное поведение системы MnFe связано с существованием резких пиков $N(E)$

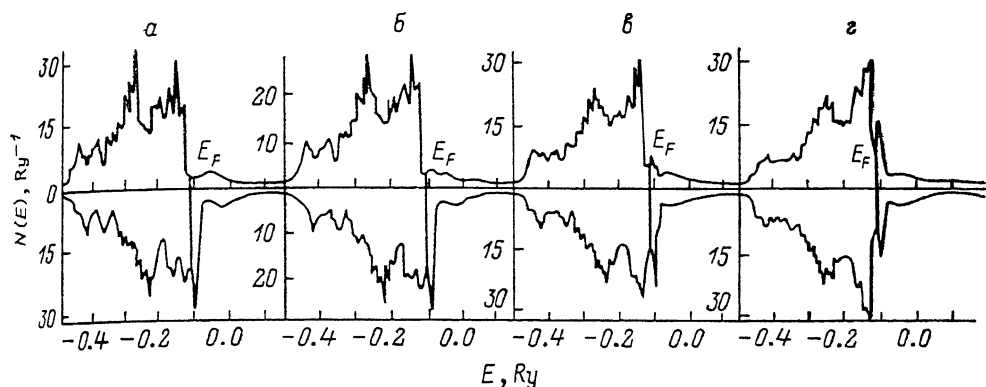


Рис. 4. Плотность электронных состояний системы MnFe при углах поворота $\theta=0.0$ (а), 0.2π (б), 0.35π (в), 0.5π (г).

вблизи уровня Ферми для ферромагнитной конфигурации примеси (рис. 4). Отметим, что величина магнитного момента на Mn плавно меняется от $1.35 \mu_B$ при $\theta=0$ до 2.25 при $\theta=\pi$.

В других расчетах [17] примеси Mn в Fe также подчеркивается резкая зависимость результатов от небольших изменений исходных параметров вычислений — вида обменно-корреляционного потенциала и межатомных расстояний.

Возможно, результаты наших более ранних расчетов с двумя устойчивыми состояниями ($\partial^2 E/\partial^2\theta > 0$ при $\theta=0$ и π) более правильно моделируют экспериментальную ситуацию в сплаве MnFe.

Совершенно иная ситуация (по сравнению с Fe) наблюдается в ферромагнитном Ni (рис. 2, а). Магнитный момент резко уменьшается при возрастании угла поворота и обращается в нуль при $\theta=\pi/2$. В этом случае $\partial E/\partial\theta \approx \sin 2\theta$, т. е. $\delta E \approx \cos^2 \theta$.

Накопец, в разбавленном сплаве MnNi (рис. 2, б) имеется практически локализованный магнитный момент марганца, слабо зависящий от угла θ , а $\partial E/\partial\theta \approx \sin \theta$, что говорит о гайзенберговском характере обмена для подрешетки Mn и одном устойчивом состоянии при $\theta=0$.

Локальная плотность состояний атома Mn в Ni также довольно слабо зависит от θ .

Для качественного понимания полученных результатов рассмотрим модель Андерсона для примеси в ферромагнитном металле с гамильтонианом

$$H = H_0 + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow},$$

$$H_0 = \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} E_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \sum_{\sigma} V_{\sigma}(\mathbf{k}) (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}), \quad (11)$$

где $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$, d_{σ}^{\dagger} — операторы рождения зонных и примесных состояний; $\epsilon_{\sigma}(\mathbf{k})$ — спектр зонных электронов со спином ($\sigma=\uparrow, \downarrow$); E_{σ} — энергия

примесного уровня; $V_{\sigma}(\mathbf{k})$ — параметры гибридизации; U — корреляционная энергия для примесного атома. При этом учтена зависимость энергии и ширины примесного уровня от σ

$$E_{\sigma} = E_1 + E_1 \sigma, \quad \Delta_{\sigma} = \pi \sum_{\mathbf{k}} |V_{\sigma}(\mathbf{k})|^2 \sigma(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \Delta_0 + \Delta_1 \sigma. \quad (12)$$

Используя статическое приближение в методе функционального интегрирования [3, 18], получим для энергии системы

$$E(v, \mathbf{n}) = v^2/U + E_1(v, \mathbf{n}), \quad (13)$$

где $E(v, \mathbf{n})$ — энергия системы с гамильтонианом

$$H_1 = H_0 + v n d_{\sigma}^{\dagger} \sigma_{\sigma\sigma'} d_{\sigma'},$$

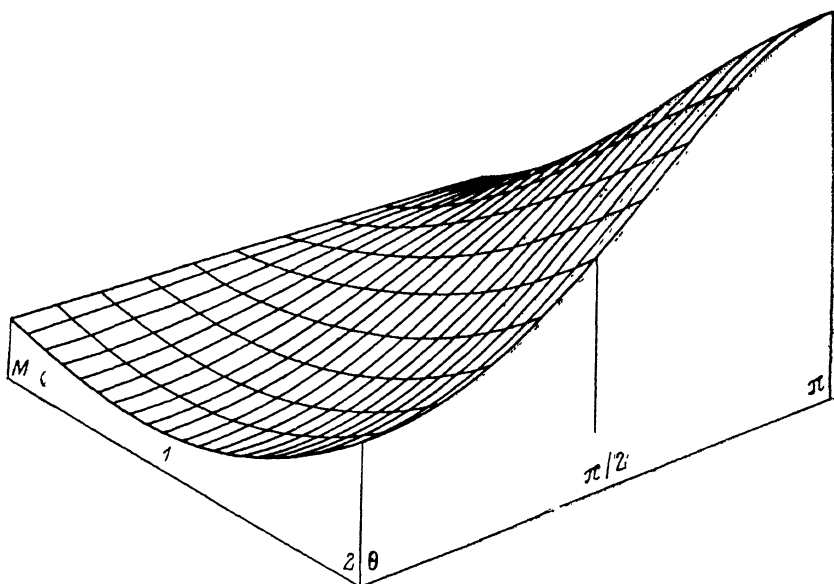


Рис. 5. Поверхность $E(M, \theta)$ для первого набора параметров.

где v, \mathbf{n} — величина и направление вспомогательных магнитных полей. Вводя угол θ между осью намагничивания матрицы Z и вектором \mathbf{n} и локальный магнитный момент $M = 2v/U$, аналогично [18] получим

$$E(M, \theta) = \frac{UM^2}{4} + (1/\pi) \text{Im} \sum_{\sigma} (-E_0 + i\Delta_0 - \sigma W) \ln(-E_0 + i\Delta_0 - \sigma W) + \text{const},$$

$$W = \left\{ \frac{U^2 M^2}{4} + UM \cos \theta (E_1 - i\Delta_1) + (E_1 - i\Delta_1)^2 \right\}^{1/2}. \quad (14)$$

Исследование выражения (14) показывает, что в зависимости от соотношения параметров возможно, что с изменением θ минимум $E(M, \theta)$ при $M \neq 0$ (магнитное решение) пропадает при некотором θ_c , а наряду с гайзенберговским вкладом в $E(M, \theta)$ ($\simeq E_1 \cos \theta$) возникают заметные негайзенберговские члены ($\simeq \Delta_1^2/U \sin^2 \theta$), которые могут привести к существованию устойчивого решения как при $\theta=0$, так и при $\theta=\pi$. Такое поведение наиболее вероятно для больших Δ_1 , т. е. когда существенно отличается ширина магнитного резонанса со спином вверх и вниз. Возможно, именно такова зависимость $\delta E \simeq \cos^2 \theta$ в чистом Ni.

На рис. 5, 6 приведены поверхности энергии $E(M, \theta)$ для двух наборов параметров: $U=2.5, E_0=-0.6, E_1=1.0, \Delta_0=1.0, \Delta_1=0.8$; $U=3.2, E_0=-0.6, E_1=0.6, \Delta_0=0.6, \Delta_1=0.5$. Хорошо видно, что первый случай (рис. 5) соответствует ситуации с одной устойчивой конфигурацией мо-

мента примеси при $\theta=0$, а затем, при $\theta_c \simeq \pi/2$, происходит исчезновение минимума на поверхности $E(M, \theta)$, соответствующее отсутствию самосогласованного магнитного решения для Fe. Во втором случае (рис. 6) мы имеем два самосогласованных различных значения магнитных моментов в ферромагнитной ($\theta=0$) и антиферромагнитной конфигурации ($\theta=\pi$), отражающих ситуацию в разбавленных сплавах MnFe и MnNi.

Интересно отметить, что результаты, полученные для угловой зависимости локального магнитного момента переходных металлов, хорошо коррелируют с данными ККР—ПКП расчетов парамагнитного состояния [4, 5]. Действительно, полностью неупорядоченная парамагнитная среда, в которой выделенный магнитный атом «чувствует» немагнитное окружение, грубо соответствует углу поворота $\theta=\pi/2$. При этом магнит-

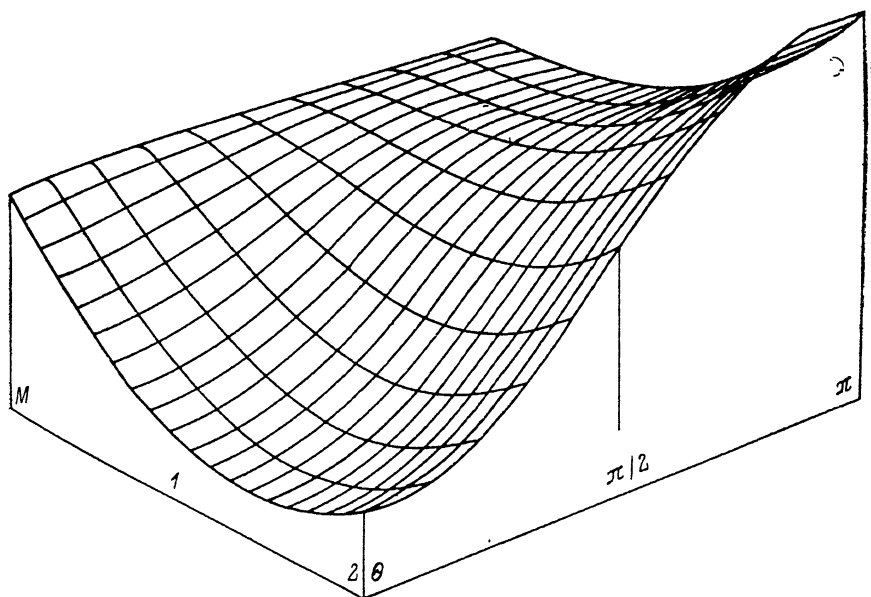


Рис. 6. Поверхность $E(M, \theta)$ для второго набора параметров.

ный момент железа уменьшается до 2.05 μ_B (ККР—ПКП — 1.92 μ_B), а в никеле пропадает локальный магнитный момент. Кластерные ККР—ПКП расчеты [5] приводили к небольшому значению магнитного момента парамагнитного никеля $\simeq 0.2 \mu_B$, тогда как более поздние и точные зонные ККР—ПКП исследования привели к отсутствию магнитного момента в парамагнитной конфигурации Ni.

Таким образом, проведенные расчеты дают количественную оценку «предельного» угла поворота магнитного момента в металлах, показывающего степень локализации спинового момента. Изучение первой производной полной энергии по углу поворота момента позволяет исследовать характер обменных взаимодействий и установить наличие сильных негайзенберговских механизмов обмена в сплаве MnFe и в ферромагнитном никеле.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Вонсовский С. В. Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.
- [2] Andersson P. W. // Solid State Physics / Ed. D. Turnbull, F. Seitz. V. 14. N. Y.: Acad. Press, 1963. P. 99—214.
- [3] Moriya T. // Spin fluctuations in itinerant electron ferromagnetism. N. Y.: Springer, 1985. 350 p.
- [4] Oguchi T., Terakura K., Hamada N. // J. Phys. F. 1983. V. 13. N 1. P. 145—160.
- [5] Gyorffy B. L., Pindor A. J., Staunton J., Stocks G. M., Winter M. // J. Phys. F. 1985. V. 15. N 2. P. 993—1011.
- [6] Liechtenstein A. I., Katsnelson M. I., Antropov V. P., Gubanov V. A. // J. Magn. Mater. 1987. V. 67. N 1. P. 65—74.
- [7] Sandratskii L. M. // Phys. St. Sol. (b). 1986. V. 135. P. 167—180.

- [8] Liechtenstein A. I., Katsnelson M. I., Gubanov V. A. // Sol. St. Comm. 1985. V. 54. N 4. P. 327—329.
- [9] Gunnarsson O., Lundquist B. I. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. N 10. P. 4274—4298.
- [10] Gunnarsson O., Jepsen O., Andersen O. K. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 13. P. 7144—7168.
- [11] Anisimov V. I., Antropov V. P., Liechtenstein A. I., Gubanov V. A., Postnikov A. V. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 10. P. 5598—5602.
- [12] Anisimov V. I., Kurmaev E. Z., Ivanovsky A. L., Gubanov V. A. // Phil. Mag. B. 1986. V. 53. N 1. P. 67—71.
- [13] Moriya T. // Prog. Teor. Phys. 1965. V. 33. N 2. P. 157—183.
- [14] Collins M. F., Low G. G. // Proc. Phys. Soc. London. 1965. V. 86. Pt 3. N 551. P. 535—548.
- [15] Radhakrishus P., Livet F. // Sol. St. Comm. 1978. V. 25. N 5. P. 597—600.
- [16] Kaizar F., Parette G. // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. N 6. P. 5471—5478.
- [17] Akai M., Akai H., Kanamori J. // J. Phys. Soc. Jap. 1985. V. 54. N 11. P. 4246—4256.
- [18] Hubbard J. // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. N 5. P. 2626—2636.

Институт химии УрО АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
24 октября 1989 г.