

© 1990

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, МАГНЕТИЗМ И АНОМАЛИИ РЕШЕТОЧНЫХ СВОЙСТВ РАЗЛИЧНЫХ ФАЗ ПЛУТОНИЯ

*В. П. Антропов, М. И. Кацнельсон, А. И. Лихтенштейн,
Г. В. Песчанских, И. В. Соловьев, А. Б. Трефилов, А. Б. Шик*

Выполнены зонные расчеты электронной структуры α -, δ -, η - и ϵ -фаз Ри релятивистским методом ASA—LMTO. Для α - и δ -фазы выполнены также спин-поляризованные расчеты, согласно которым δ -фаза оказывается магнитной в противоположность α -фазе. Рассчитано изменение полной энергии E_{tot} при $\delta \rightarrow \eta \rightarrow \epsilon$ переходах. Найдено, что η -фаза соответствует локальному минимуму E_{tot} как функции тетрагональной деформации. Вычислены электронные вклады в модули упругости δ -Ри, электронные параметры Грюнайзена в δ -, η - и ϵ -фазах. Обсуждается природа скачка объема при $\alpha \rightarrow \delta$ переходе и аномалий теплового расширения в δ - и η -фазах.

По многим физическим свойствам Ри является уникальным объектом среди металлов: богатый полиморфизм (при давлении $P=0$ стабильны α -, β -, γ -, δ -, η - и ϵ -фазы), большие скачки объема при $\alpha \rightarrow \beta \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$ переходах, отрицательные значения коэффициента теплового расширения α , в δ -фазе, низкая температура плавления (как и у Nr) в ряду актинидов [1], необычно большое значение линейного члена в низкотемпературной теплоемкости α -фазы и стабилизированной примесями δ -фазы [2] и др. С точки зрения электронной структуры Ри интересен тем, что при движении по актинидному ряду в периодической таблице именно в районе Ри происходит резкое уменьшение ширины $5f$ -зоны и, следовательно, переход от коллективизированного поведения $5f$ -электронов (у Th, Pa, U, Nr) к локализованному (у Am и последующих элементов) [3]. Расчеты электронной структуры Ри привлекались для объяснения физических свойств в ряде работ. В [4] была рассчитана электронная структура одиночных примесей Al, Ga в δ -Ри с целью объяснения их стабилизирующего влияния на δ -фазу. В [5] исследовался вопрос об электронной природе большого скачка объема при $\alpha \rightarrow \delta$ переходе (при этом промежуточные фазы β , γ не рассматривались, а моноклинная α -фаза, как и во всех остальных расчетных работах, моделировалась ГЦК-структурой с постоянной решеткой, соответствующей экспериментальному объему α -фазы). В [6] вычислялся параметр Стонера в α - и δ -Ри. Однако высокотемпературные η - и ϵ -фазы, по-видимому, вообще не исследовались зонными методами; практически не обсуждался в литературе вопрос об электронной природе аномального теплового расширения δ -фазы. Наконец, не учитывалась возможность появления магнитного момента в Ри (что связано с определенными трудностями проведения спин-поляризованных релятивистских расчетов).

В настоящей работе выполнены зонные расчеты α -, δ -, η - и ϵ -фаз Ри, исследованы вопрос о скачке объема при $\alpha \rightarrow \delta$ переходе с учетом возможного появления магнитных моментов, изменение электронной структуры при $\delta \rightarrow \eta \rightarrow \epsilon$ переходах (тетрагональная деформация), а также вычислены электронные вклады в модули упругости δ -Ри и тепловое расширение δ -, η - и ϵ -Ри.

В разделе 1 исследованы «коллапс» f -электронов при $\delta \rightarrow \alpha$ переходе и возможность возникновения магнитных моментов в α -, δ -фазах. В разделе 2

представлены результаты расчетов электронной структуры при $\delta \rightarrow \gamma \rightarrow \alpha$ переходе. В разделе 3 обсуждается вопрос о физической природе аномального теплового расширения δ - и γ -Pu².

1. Коллапс f -электронов и возникновение магнетизма при $\alpha \rightarrow \delta$ переходе

Резкое изменение ширины f -зоны в ГЦК Pu при изменении объема от α -до δ -фазы обнаружено в зонных расчетах [3, 5]. Аналогичное явление имеет место при $\alpha \rightarrow \gamma$ переходе в Ce [7]. Как показано в [8], физической предпосылкой резкого изменения ширины f -зоны при относительно небольшом изменении внешних параметров является известное в атомной физике явление коллапса f -электронов [9]. Атомные расчеты [8] показывают, что такой коллапс имеет место в Ce, Pr, U, Np, Pu при переходе от f^{n+1} к

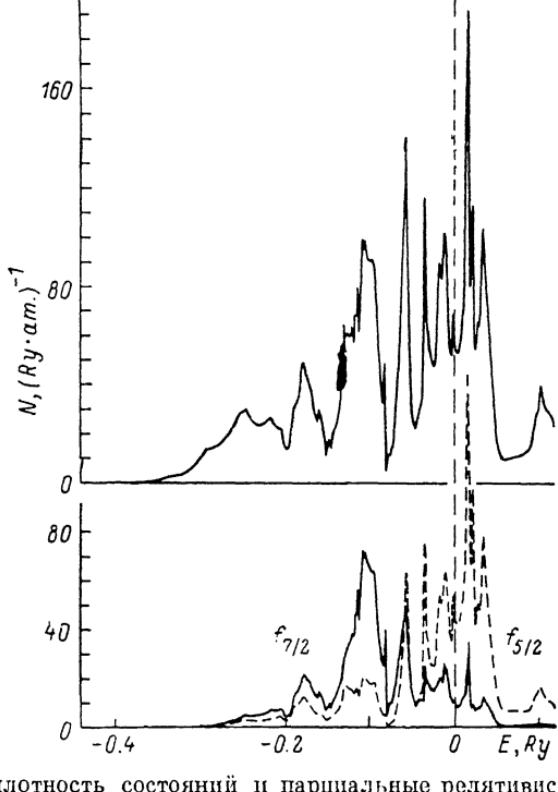


Рис. 1. Полная плотность состояний и парциальные релятивистские ($f_{7/2}$, $f_{5/2}$) вклады в $N(E)$ для α -фазы плутония.

f^n конфигурации, при этом он сопровождается значительным уменьшением ширины канонической f -зоны. Результаты зонных [7] и атомных [8] расчетов подтверждают старую идею Йоханссона [10] о делокализации f -электронов (без изменения их орбитального состояния) как причине $\gamma \rightarrow \alpha$ перехода в Ce. Согласно [8], такой же может быть природа состояний с «промежуточной валентностью» в соединениях актинидов.

Результаты зонных расчетов, выполненных нами в рамках релятивистского спин-поляризованного метода ASA-LMTO, показаны на рис. 1, 2 и в табл. 1. В согласии с [3] мы видим, что ширина f -зоны при переходе от δ -Pu к α -Pu увеличивается в 1.5 раз. Важно отметить, что при этом число f - и d -электронов практически не изменяется (табл. 1). Таким образом, делокализация f -электронов в Pu происходит не по механизму «promotion» ($f \rightarrow d$ переход, как, скажем, в соединениях Sm), а по «механизму моттовского перехода» [10], физической основой которого, согласно [8], является возможность коллапса f -электронов в атоме Pu.

Сужение f -зоны может создавать предпосылки для формирования магнитных моментов (как известно, γ -Ce антиферромагнетен в отличие от не-

магнитного α -Ce). Видно, что при «растяжении» α -фазы на 10 % возникает (почти скачком) магнитный момент, так что в δ -фазе спиновый момент $M_s = 4.5 \mu_B$, а орбитальный момент $M_L = -2.4 \mu_B$ (в соответствии с правилами Хунда расчет показывает, что M_s и M_L имеют разные знаки). Отметим, что при экспериментальном объеме решетки α -фазы скалярно-релятивистские расчеты дают сильномагнитное основное состояние ($M_s = 3 \mu_B$). Учет релятивистских эффектов приводит к тому, что при той же постоянной решетки магнитное решение не является устойчивым, и в ре-

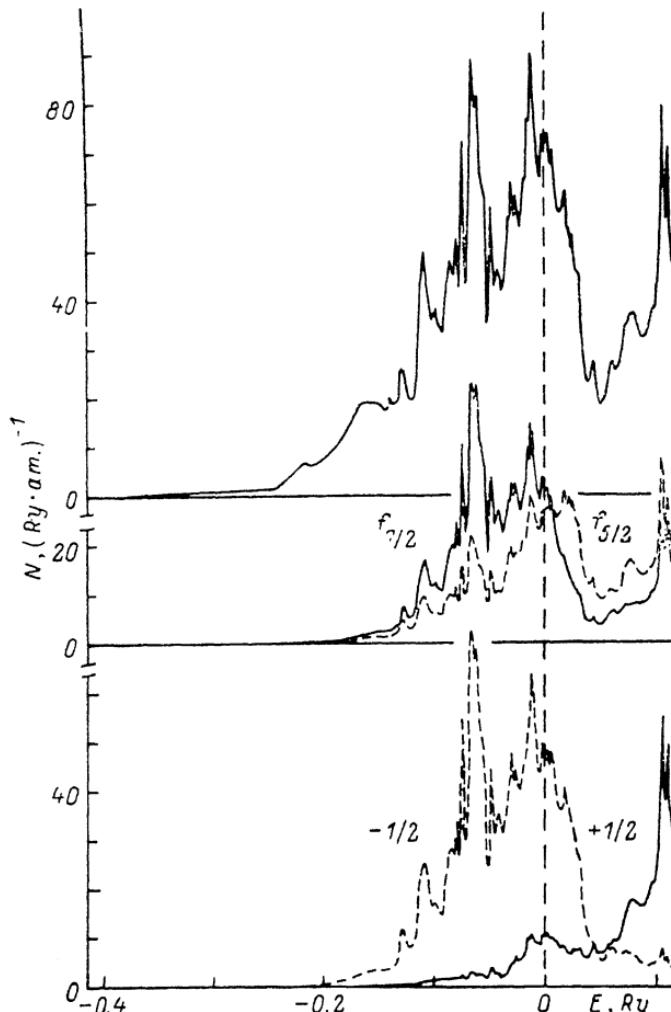


Рис. 2. Полная плотность состояний и парциальные релятивистские ($f_{7/2}$, $f_{5/2}$) и спиновые ($f_{+1/2}$, $f_{-1/2}$) вклады в $N(E)$ для δ -фазы плутония.

зультате процесса самосогласования магнитный момент исчезает. Таким образом, совместное влияние двух эффектов — релятивистская перенормировка параметров гамильтонiana и соответственно сдвиг равновесной постоянной решетки и релятивистского эффекта Зеемана — существенным образом сказывается на улучшении сравнения экспериментальных результатов и наших расчетов. Подробнее вопрос о роли спин-орбитального взаимодействия рассмотрен в работе [11].

Таким образом, переход от делокализованного (и немагнитного) поведения f -электронов к локализованному (и магнитному) происходит в Ри при переходе от α - к δ -фазе. В этом смысле Ри как $5f$ -элемент является аналогом $4f$ -металла Ce (α — γ переход). Вывод о магнетизме δ -фазы Ри нуждается в экспериментальной проверке (разумеется, она может быть не ферромагнитной, а антиферромагнитной по аналогии с γ -Се).

Таблица 1

Рассчитанные значения полных и парциальных (f) состояний на уровне Ферми, логарифмических производных плотности состояний по объему, полуширины f -зон w_f для ГЦК-фазы плутония при различных значениях объема

V_{WS} (а. е.) ³	N_K	$N(E_f)$, $\frac{1}{Ry \cdot ат.}$	$\frac{\partial \ln N(E_f)}{\partial \ln V}$
102.11	95	31.27	—
113.04	95	26.52	—
124.725	95	1.14	—
134.76	95	11.799	—
153.763	95	24.03	—
168.062	95	32.36	6.22
169.391	95	34.65	—

Таблица 1 (продолжение)

V_{WS} (а. е.) ³	P , кбар	N_f		w_f	
		$5/2$	$7/2$	$5/2$	$7/2$
102.11	—92.5	3.20	2.158	0.1014	0.169
113.04	—174.8	3.421	1.885	0.0822	0.1408
124.725	—243.9	3.629	1.634	0.0672	0.1184
134.76	—235.2	3.739	1.484	0.0570	0.1032
153.763	—234.0	3.985	1.188	0.042	0.0816
168.062	—201.6	4.149	0.983	0.0359	0.0696
169.391	—192.6	4.205	0.961	0.0348	0.0680

$V_{WS} = 168.062$ (а. е.)³ соответствует экспериментальному значению объема в δ -фазе. τ

В этой связи отметим, что результат [5] о решающем вкладе теплового давления в α — δ переход в Ри может изменяться при учете спиновой поляризации. Так, «магнитный» вклад в давление δ -Ри, по нашим данным, составляет величину порядка 200 кбар. Возможно, что при учете этого вклада скачок объема при α — δ переходе может быть объяснен без учета теплового расширения. Во всяком случае возможность появления локальных магнитных моментов при α — δ переходе может существенно изменить картину этого перехода.

2. Изменение электронной структуры при σ — η — ε переходе

Исследование полиморфизма Ри представляет собой существенный интерес для общей проблемы структурных превращений в металлах и сплавах. ОЦК—ГЦК переходы весьма распространены, и определение характера смещения атомов при этих переходах является классической задачей физического материаловедения. Наиболее традиционной моделью ОЦК—ГЦК перехода является байновская деформация, когда ГЦК решетка рассматривается как объемоцентрированная тетрагональная (ОЦТ) с параметром тетрагональной деформации $c/a = \sqrt{2} = 1.41$ [12]. Структурный δ — ε (ОЦК—ГЦК) переход в Ри имеет ту особенность, что идет через промежуточную η -фазу, которая (если не считать небольших изменений объема $\leq 1\%$ [1]) лежит точно «по пути» байновской деформации и соответствует $c/a = 1.33$. Тем самым все три структуры δ , η и ε могут быть получены единным образом как ОЦТ структуры с $c/a = \sqrt{2}$, 1.33, 1 соответственно. Существование промежуточной η -фазы в Ри, на наш взгляд, демонстрирует реальность байновской деформации по пути ОЦК—ГЦК перехода. Возникает, однако, вопрос, почему в Ри в отличие от других металлов переход

«застрекает» по дороге, т. е. идет через промежуточную η -фазу. Нами выполнены зонные расчеты ОЦТ структуры Ru при разных объемах Ω_0 и $1 \leq c/a \leq \sqrt{2}$.

3. Результаты расчетов

Результаты представлены на рис. 3 и в табл. 2. Видна высокая чувствительность электронной структуры вокруг E_f , в частности $N(E_f)$, к значениям тетрагональной деформации c/a . Полная энергия $E(c/a)$ имеет минимум вблизи $c/a = 1.33$, что, по-видимому, объясняет стабилизацию промежуточной η -фазы. Это коррелирует с понижением плотности состояний на уровне Ферми в η -фазе по сравнению с ϵ -фазой (табл. 2).

Таблица 2

Рассчитанные значения полных и парциальных (f) состояний на уровне Ферми, логарифмических производных плотности состояний по объему и параметру тетрагонального искажения, полуширины f -зон для различных фаз плутония

Фаза	c/a	V_{WS} , (а. е.) ³	N_K	$\frac{N(E_f)}{\text{Ry} \cdot \text{ат.}}$	$\frac{\partial \ln N(E_f)}{\partial \ln V}$
δ	1.4442	168.062	95 (FCC)	32.54	6.22
η	1.329	167.033	135 (BCT)	38.12	0.02
ϵ	1.00	162.097	55 (BCC)	40.41	-1.335

Таблица 2 (продолжение)

Фаза	$\frac{\partial \ln N(E_f)}{\partial \ln (c/a)}$	P , кбар	N_f		w_f	
			5/2	7/2	5/2	7/2
δ	—	-195.04	4.449	0.983	0.0359	0.0696
η	-7.66	-203.6	4.440	0.998	0.0363	0.0702
ϵ	—	-270.0	4.086	1.067	0.0383	0.0728

Анализ парциальных плотностей состояний показывает практически одинаковое спин-орбитальное расщепление 5f-состояний плутония в различные фазах. Из табл. 2 хорошо видна тенденция к расщеплению и сужению f-зоны Ru при переходе от ОЦК к ГЦК решетке. Отметим также увеличение межатомного расстояния при таком $\epsilon \rightarrow \delta$ переходе, что приводит к уменьшению гибридизации и образованию резких пиков от локализованных f-состояний вблизи уровня Ферми ГЦК плутония. Возможно, положение уровня Ферми в локальном минимуме плотности состояний η -фазы Ru является причиной стабилизации данной структуры.

Так как $N(E)$ вблизи E_f весьма чувствительна к c/a , можно ожидать существенных аномалий в электронных вкладах в модули упругости $C_{ik}^{[13]}$. Последние были получены по формулам [14]

$$C(E) = \frac{3}{4} \int_{\Omega} \sum_n \left\{ (\partial^2 E_n(k) / \partial^2 \gamma) \theta(E_n(k) - E) - (\partial E_n(k) / \partial \gamma_i)^2 \delta(E(k) - E) \right\} dk = \\ = C'(E) + C_s(E), \quad (1)$$

где γ — параметр тетрагональной и тригональной деформаций для C' и C_s .

Результаты расчетов для δ -фазы Ru приведены на рис. 3. Видно, что в модуле C' (тетрагональном модуле сдвига) особенности $N(E)$ вблизи E_f прорисовываются яснее, чем в тригональном модуле сдвига $C_{44}(E)$, что, по-видимому, означает более высокую чувствительность состояний, фор-

мирующими пики $N(E)$ в δ -Ри, к тетрагональной деформации, чем к тригональной.

На рис. 4 изображены результаты расчетов $E_n(k)$ и групповая скорость $|V_n(k)| = |\partial E_n(k)/\partial k|$ для δ -Ри. Групповые скорости $V_n(k)$ находились

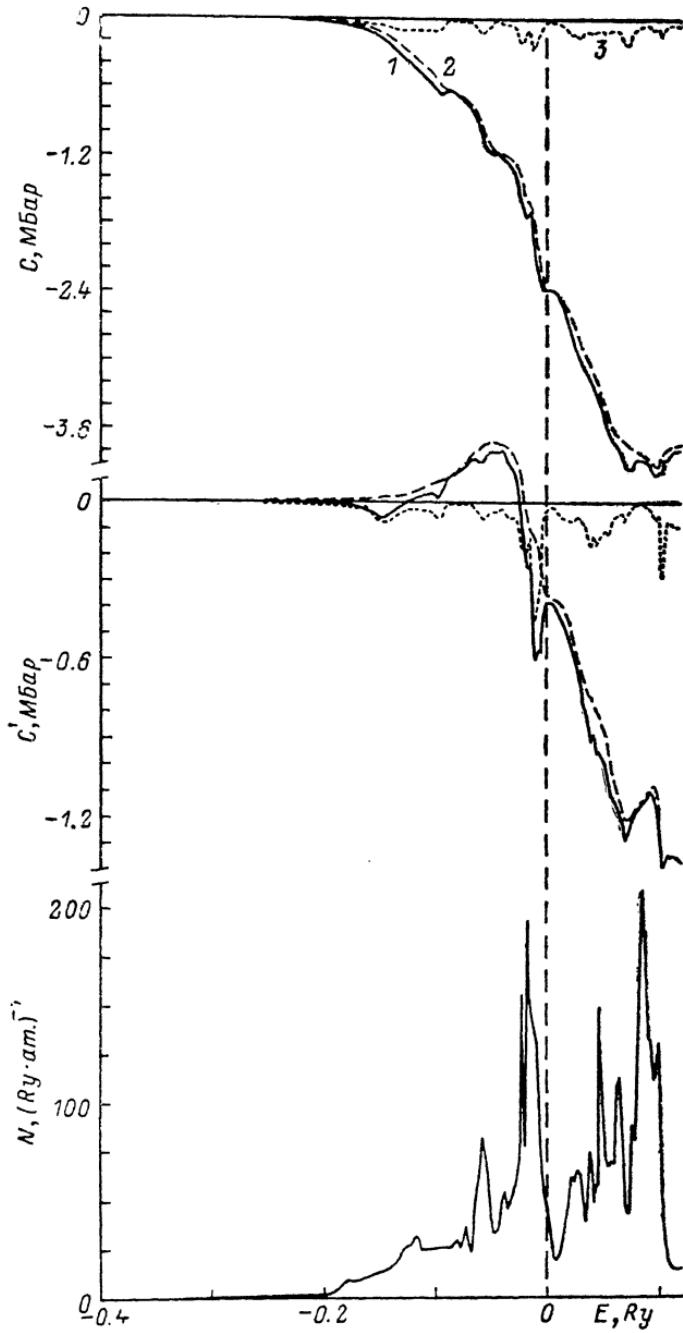


Рис. 3. Полная плотность, состоящий для немагнитного, релятивистского δ -плутония и зависимости зонного (1), «объемного» C_s (2) и поверхностного C_s (3) вкладов в $C'(E)$ и $C_{44}(E)$.

численным дифференцированием. Видно, что в немагнитном δ -Ри имеется довольно много особенностей Ван Хова ($V_n(k)=0$) вблизи E_F ; особенности в точках U и K находятся ближе всех остальных к E_F ($E_c - E_F \approx -0.0004$ Ry).

Как видно из рис. 5, поверхность Ферми хорошо вписывается в угол зоны Бриллюэна U, K , что должно приводить к усилению этих особенностей [15]. Однако обилие близко лежащих по энергии особенностей Ван Хова не

позволяет этой аномалии проявиться достаточно ярко в плотности состояний. Обращает на себя внимание обилие отрезков линий постоянной энергии ($V_n(\mathbf{k})=0$) приблизительно на 0.01 Ry ниже E_F в δ -фазе Ру. Соответственно особенности в $N(E)$, как подробно обсуждалось в [15], порядка

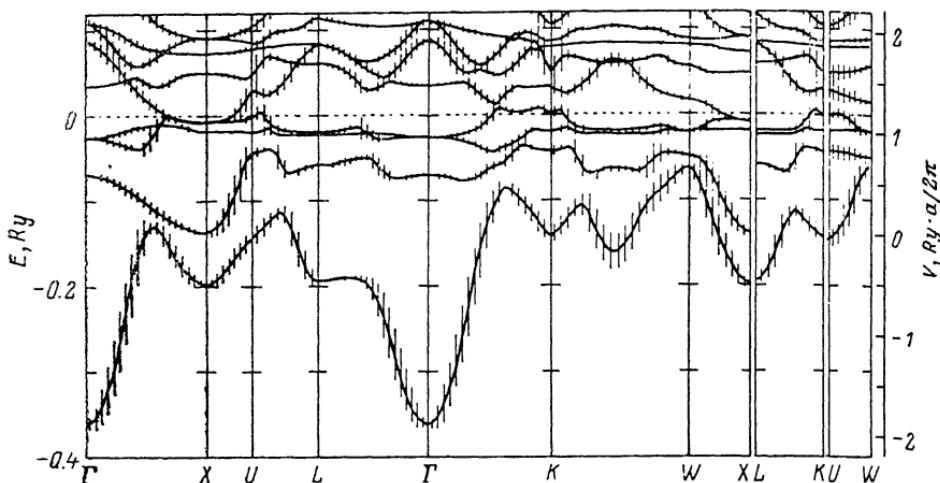


Рис. 4. Зависимости $E_n(\mathbf{k})$ (линии) и $|V_n(\mathbf{k})|$ (вертикальные штрихи) в соответствующих \mathbf{k} -точках; отложены на $|V_n(\mathbf{k})|$ вверх и вниз от соответствующей линии $E_n(\mathbf{k})$ в единицах, приведенных на шкале справа).

Исчезновение вертикальных штрихов на дисперсионных кривых соответствует появлению особенностей Ван Хова ($V_n(\mathbf{k})=0$) в соответствующих \mathbf{k} -точках.

$\ln |E - E_c|$. По-видимому, именно эти особенности формируют гигантский пик $N(E)$ в δ -Ру. Аналогичные «гигантские» особенности Ван Хова были обнаружены нами в Sr и Ca [15].

Расчет электронного вклада в C_{ik} проведен для $T=0$. Однако можно показать [17], что температурно-зависящая часть $C_{ik}(T)$ имеет особенности, более сильные (по параметру $E_c - E_F$, где E_c — особая точка электронного спектра), чем в $C_{ik}(T=0)$.

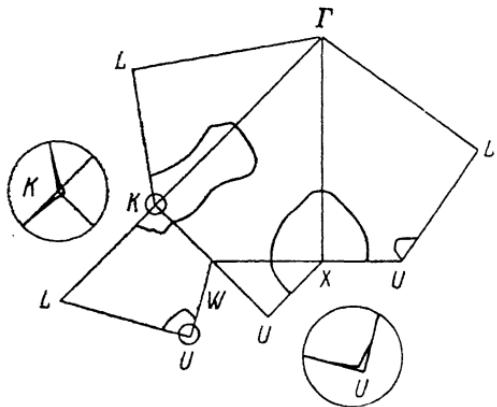


Рис. 5. Сечение поверхностью Ферми неприводимой части зоны Бриллюзона для δ -Ру.

Обращает на себя внимание окрестность точек U и K (даны в увеличенном масштабе), в которых поверхность Ферми почти точно вписывается в зону Бриллюзона.

4. О возможной природе аномального теплового расширения в δ - и η -фазах

Коэффициенты теплового расширения $\alpha_i = \partial u_i / \partial T$ некубического металла (u_i — различные деформации) могут быть представлены в виде

$$\alpha_i = \sum_j (C^{-1})_{ij} \partial S / \partial u_j,$$

где C_{ij} — модуль упругости, $(C^{-1})_{ij}$ — элементы обратной матрицы, S — энтропия [16]. В частности, для одноосного металла

$$\alpha_{\parallel} = (1/3BB_{22}) [(B_{22} - 2B_{12}) \partial S/\partial u_1 + (2B_{11} - B_{12}) \partial S/\partial u_2],$$

$$\alpha_{\perp} = (1/3BB_{22}) [(B_{22} - 2B_{12}) \partial S/\partial u_1 - (2B_{11} + B_{12}) \partial S/\partial u_2],$$

$$\beta = (1/BB_{22}) [(B_{22}\partial S/\partial u_1 - B_{12}\partial S/\partial u_2)],$$

где мы ввели объемные и тетрагональные деформации u_1 и u_2 , $du_1 = d \ln \Omega$, $du_2 = d \ln (c/a)$; соответствующие модули упругости обозначены через B_{ij} ; $B = B_{11} - B_{12}/B_{22}$ — модуль сжатия; α_{\parallel} , α_{\perp} — коэффициенты теплового расширения вдоль оси c и в перпендикулярном направлении; $\beta = \alpha_{\parallel} + 2\alpha_{\perp}$ — суммарный коэффициент теплового расширения. В зависимости от соотношений между коэффициентами перед $\partial S/\partial u_1$ и $\partial S/\partial u_2$ α_{\parallel} и α_{\perp} могут иметь разные знаки. В δ -Ри согласно [1], $\alpha_{\parallel} = -10^{-3}$, $\alpha_{\perp} = 4 \cdot 10^{-4}$, $\beta = -6 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$. Так как для всех известных кристаллов $2B_{11} - B_{12} > 0$, $B_{11} + B_{12} > 0$, то в выражении (2) знак от вкладов от $\partial S/\partial u_2$ в α_{\parallel} и α_{\perp} всегда положительны. Чтобы объяснить большие отрицательные значения α_{\parallel} и большие положительные значения α_{\perp} в γ -фазе Ри, необходимо показать, что $|\partial S/\partial u_2| \gg |\partial S/\partial u_1|$ и при этом $\partial S/\partial u_2 < 0$. На основе обычного зонного расчета можно найти электронные вклады в $\partial S/\partial u_i$:

$$S = (\pi^2/3) N(E_f) T, \quad \partial S/\partial u_i = S \gamma_{ei}, \quad \gamma_{ei} = \partial \ln N(E_f)/\partial u_i.$$

Логарифмические производные от $N(E_f)$ по u_1 и u_2 в γ -фазе, согласно расчету (табл. 1, 2), равны $\partial \ln N(E_f)/\partial \ln u_2 = -7.7$, $\partial \ln N(E_f)/\partial \ln u_1 = 0.02$; поэтому при низких температурах в γ -Ри мы имели бы $\alpha_{\parallel} < 0$, $\alpha_{\perp} > 0$. Хотя именно таково экспериментальное соотношение α_i в γ -Ри, на наш взгляд, проведенный расчет не имеет прямого отношения к высокотемпературному тепловому расширению, которое определяется не электронными, а фононными параметрами Грюнайзена

$$\gamma_{pi} \approx \sum (-\partial \ln \omega_i(T)/\partial u_i),$$

где $\omega_i(q)$ — фононная частота, $T \gg \Theta_D$ (Θ_D — температура Дебая). Однако характер особенностей в γ_{ei} и γ_{pi} может быть одинаковым. Так, если E_f приближается при температурном расширении ($u_2 > 0$) к узкому пику плотности состояний $N(E)$ ($\Delta = E - E_f \rightarrow 0$), то $\gamma > 0$. При этом [16, 17] фононная частота приобретает добавку $\delta \omega_i(q) \approx \ln \Delta$ и $\gamma_{pi} \approx -\Delta/\partial u_2/\Delta > 0$ и, таким образом, знаки сингулярных по Δ вкладов в низкотемпературные и высокотемпературные коэффициенты теплового расширения совпадают. Это и оправдывает использование результатов зонных расчетов электронных параметров Грюнайзена для анализа теплового расширения при высоких температурах.

К сожалению, такие простые соображения не позволяют объяснить знаки коэффициента β в ГЦК (δ) и ОЦК (ϵ) фазах: для δ -Ри из табл. 2 видно, что $\gamma_e = \partial \ln N(E_f)/\partial \ln \Omega > 0$ (в то время как экспериментально $\beta < 0$), а для ϵ -фазы Ри $\gamma_e < 0$ (в то время как экспериментально $\beta > 0$). Что касается ϵ -фазы, то она существует в относительно узком температурном интервале вблизи температуры плавления, где заведомо велики ангармонические и, возможно, вакансационные вклады в β , так что здесь трудно было рассчитывать даже на качественное совпадение с экспериментом.

Качественное несоответствие результатов спин-ограниченного расчета для δ -Ри с экспериментом ($\beta < 0$), по-видимому, связано с неучетом магнетизма δ -Ри. Согласно приведенным выше результатам (раздел 2) δ -Ри близок к критерию исчезновения магнитного момента и в этом смысле является аналогом γ -Fe [18]. Не исключено поэтому, что отрицательное тепловое расширение δ -Ри имеет ту же природу, что и инвариантные аномалии в сплавах Fe-Ni [19], т. е. связано с сильной чувствительностью величины магнитного момента к температуре и изменению объема.

В заключение сделаем замечание о возможной причине низкой температуры плавления T_m Ри. Как обсуждалось в [20], T_m понижается в силу

роста амплитуды тепловых колебаний атомов при попадании E_f на узкий пик $N(E)$. Из рис. 2 видно, что в ϵ -фазе Ru E_f действительно лежит на таком пике.

Таким образом, результаты настоящей работы показывают, что целый ряд аномальных свойств Ru (резко анизотропное тепловое расширение в γ -фазе, стабилизация промежуточной γ -фазы при $\delta \rightarrow \epsilon$ переходе и др.) обусловлен особенностями электронного спектра Ru. При рассмотрении аномальных свойств δ -фазы (отрицательный коэффициент теплового расширения, большой скачок объема при $\alpha \rightarrow \delta$ переходе), по-видимому, существенен учет магнетизма δ -фазы.

Список литературы

- [1] Plutonium Handbook. A guide to the technology. V. 2 / Ed. O. K. Wiok. N. Y., 1967.
- [2] Fournier J. M., Troc R. // Handbook on the Physics and Chemistry of Actinides / Ed. A. J. Freeman and G. H. Lander. Chapt. 2. 1985. V. 2. P. 29—173.
- [3] Brooks M. S. S., Johansson B., Skriver H. L. // Ibid. 1984. V. 1. P. 153—269.
- [4] Weinberger, A. M. Boring, J. L. Smith. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 4. P. 1964—1971.
- [5] Brooks M. S. S., Johansson B., Eriksson O., Skriver H. L. // Physica B+C. 1986. V. 144. N 1. P. 1—13.
- [6] Eriksson O., Brooks M. S. S., Johansson B. // J. de Physique. 1988. Coll. 8. Suppl. N 12. V. 49. P. 695—696.
- [7] Podloucky R., Glotzel D. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 6. P. 3390—3399.
- [8] Камышенко В. В., Кацнельсон М. И., Лихтенштейн А. И., Трефилов А. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 12. С. 3581—3585.
- [9] Каразия Д. И. // УФН. 1981. Т. 135. № 1. С. 79—115.
- [10] Johansson B. // Phil. Mag. 1974. V. 30. N 3. P. 469—480.
- [11] Соловьев И. В., Шик А. Б., Антропов В. П., Лихтенштейн А. И., Губанов В. А., Andersen O. K. // ФТТ. 1989. Т. 31. N 8. С. 13—20.
- [12] Хачатурян Г. Н. // Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М., 1974. 384 с.
- [13] Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // УФН. 1988. Т. 154. № 3. С. 523—525; Антропов В. П., Вакс В. Г., Кацнельсон М. И., Корешков В. Г., Лихтенштейн А. И., Трефилов А. В. // УФН. 1988. Т. 154. № 3. С. 525—528.
- [14] Ohta Y., Shimizu H. // J. Phys. F. 1983. V. 13. N 4. P. 761—777.
- [15] Кацнельсон М. И., Песчанских Г. В., Трефилов А. В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 2. С. 345—354.
- [16] Antropov V. P., Katsnelson M. I., Koreshkov V. G., Liechtenstein A. I., Trefilov A. V., Vaks V. G. // Phys. Lett. 1988. V. 130A. N 2. P. 155—160.
- [17] Katsnelson M. I., Trefilov A. V. // Physica B. 1990. V. 12. N 1. P. 45—67.
- [18] Kubler J. // Phys. Lett. A. 1981. V. 81. N 1. P. 81—84.
- [19] Седов В. Л. Антиферромагнетизм гамма-железа. Проблема инвара. М., 1987. 286 с.
- [20] Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 43. № 10. С. 393—396.

Институт физики металлов
УрО АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
24 апреля 1990 г.