

Расчет из первых принципов фононных частот в γ -Fe

© С.А. Останин, Е.И. Саламатов, В.И. Кормилец

Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук,
426001 Ижевск, Россия

(Поступила в Редакцию 12 августа 1996 г.)

Полнопотенциальным методом ЛМТО вычислены полная энергия, равновесная постоянная решетки и объемный модуль ГЦК-фазы железа. Обсуждается использование обобщенного градиентного приближения при расчете электронной структуры и решеточных свойств γ -Fe. Затем методом "замороженных фононов" в гармоническом приближении рассчитана фононная частота поперечных колебаний в точке W зоны Бриллюэна ГЦК-решетки. Обнаружено наличие локального минимума на кривой изменения полной энергии системы в зависимости от амплитуды атомных смещений, отвечающих выбранной моде нормальных колебаний. Для учета анагармонических эффектов использована псевдогармоническое приближение и построен эффективный потенциал, который аппроксимирует кривую изменения полной энергии системы и зависит от температуры через коррелятор среднеквадратичного смещения атомов из положения равновесия. Теоретическая температурная зависимость эффективной частоты фононной моды, которая ответственна за структурный фазовый переход, качественно соответствует экспериментально наблюдаемой. Дана новая интерпретация структурного фазового перехода как перехода соответствующей фононной моды из возбужденного состояния в основное.

Постоянный интерес к теоретическому изучению мартенситных фазовых переходов стимулируется обширным экспериментальным материалом, накопленным при исследовании этой большой по фундаментальной и прикладной значимости задачи. В микроскопическом описании мартенситных фазовых переходов можно выделить три основных подхода. Первый из них связан с анализом особенностей электронных состояний в кристаллах, например [1–4]. Второй основан на исследовании особенностей динамики решетки [1,5,6]. Третьим подходом может считаться первопринципный метод молекулярной динамики Кара-Паринелло [7], который синтезирует первые два, поскольку расчет сил, действующих на ядра атомов в системе, ведется из первых принципов на основе вычисления электронной плотности в большой кристаллической ячейке, а анагармонизм системы учитывается явно при решении уравнений движения. В настоящее время метод Кара-Паринелло в силу вычислительных затрат ограничен рассмотрением систем, состоящих из нескольких десятков атомов. При таком молекулярно-динамическом моделировании расчет электронных состояний до сих пор ведется методом псевдопотенциала [8], конкретные реализации которого для исследования переходных металлов продолжают совершенствоваться [9]. Заметим, что системы переходных металлов — наиболее интересные объекты изучения структурных фазовых переходов.

Современное состояние зонной теории и развитие последовательных *ab initio* методов вычисления электронной структуры кристаллов [10] открывают широкие возможности для теоретического исследования динамики решетки применительно к системам *d*-металлов. Зонная теория, в основе которой лежит концепция функционала электронной плотности [11]

и метод Кона-Шэма [12], позволяет провести самоогласованный расчет свойств основного состояния кристалла, в том числе полной энергии и распределения электронной плотности [13]. При расчете полной энергии возможно получение фононных частот для выбранных колебательных мод методом "замороженных фононов" [14] через вычисление разности полных энергий идеальной и искаженной кристаллических решеток. Смещения атомов в искаженной решетке отвечают выбранной нормальной моде, определяют частоту фонона с волновым вектором, который соизмерим с каким-либо вектором обратной решетки.

Появившийся недавно вариационный метод линейного отклика [15,16] в отличие от метода "замороженных фононов" не требует введения суперячейки и может использоваться для расчета фононных частот с любым волновым вектором и в любой по сложности кристаллической ячейке. В основе вариационного метода линейного отклика лежит отыскание поправок первого порядка к волновым функциям заполненных электронных состояний при слабом возмущении кристаллического потенциала. Такие поправки являются решением неоднородного дифференциального уравнения второго порядка шредингеровского типа. До недавнего времени основой расчетной схемы метода линейного отклика служила схема псевдопотенциала [15]. Авторы работы [16] предложили в качестве быстросходящегося базисного набора *muffin-tin*-орбитали, что сразу обеспечило детальный расчет фононных спектров переходных металлов при хорошем согласии с экспериментом [17]. Подробное состояние исследований в этой области и сравнительный анализ методики линейного отклика изложены в недавно вышедшем обзоре Саврасова и Максимова [17]. Как показано в [17], при большом преимуществе в эффективности метода линейного отклика по отноше-

нию к методу "замороженных фононов" точности вычисления фононных частот, сил и индуцированной смещением атомов электронной плотности практически одинаковы. Заметим, что оба обсуждаемых нами метода основаны на вычислительной схеме полнопотенциального метода линейных muffin-tin-орбиталей (ПП-ЛМТО) [16,18], который учитывает эффекты несферичности электронной плотности и кристаллического потенциала.

В данной работе вычислена из первых принципов методом ПП-ЛМТО [18] полная энергия одной из структурных модификаций железа: γ (ГЦК). Затем методом "замороженных фононов" рассчитаны фононные частоты в избранной точке высокой симметрии зоны Бриллюэна ГЦК-решетки. Выбор объекта исследования мотивирован результатами работы [19], где нами в относительно простой модели в квазигармоническом приближении проводился анализ изменения динамических и упругих свойств α - и γ -фаз Fe в зависимости от изменения решеточной константы. Было обнаружено наличие в γ -фазе железа мягкой моды, которая локализована в точке W ($k = (2\pi/a)(0.5, 1, 0)$) зоны Бриллюэна), имеет поперечную поляризацию и, возможно, ответственна за $\gamma - \alpha$ -переход в железе. При этом атомные смещения в данной моде аналогичны наблюдаемым смещениям [20] и также хорошо согласуются с результатами теоретической работы [21]. Попытка расчета фононных частот ГЦК-Fe из первых принципов методом "замороженных фононов" на основе ПП-ЛМТО схемы предпринята в недавно вышедшей работе [22]. Авторы вычислили фононные частоты в нескольких высокосимметричных точках зоны Бриллюэна. Однако интересующая нас точка W осталась вне рассмотрения. Предлагаемое теоретическое исследование может представлять интерес и для экспериментаторов, поскольку данные по измерению спектров колебаний для обсуждаемой высокотемпературной γ -фазы железа пока не публиковались.

1. Электронная структура γ -железа

Магнитная структура и электронные свойства γ -Fe остаются недостаточно понятными из-за трудностей экспериментального исследования ГЦК-железа. В [23] авторами из первых принципов с помощью метода ЛМТО, обобщенного на случай спиральной магнитной структуры, показано, что при сильной момент-объемной неустойчивости минимум полной энергии в ГЦК-Fe приходится на неколлинеарную магнитную структуру. В тех же приближениях (локальном приближении спиновой плотности и приближении атомных сфер), но уже методом присоединенных сферических волн в [24] получен аналогичный результат для широкого интервала значений постоянной решетки. Абсолютный минимум полной энергии γ -Fe, согласно [24], и для спиральной маг-

нитной, и для немагнитной конфигураций совпадает. Этот факт может служить аргументом в пользу нашей модели исследования динамических свойств ГЦК-железа как немагнитного, поскольку мы будем искать, искажая решетку, изменение полной энергии системы относительно абсолютного минимума. Следует отметить, что упомянутые расчеты выполнены в нерелятивистской постановке задачи, а как показано нами ранее [25], включение спин-орбитального взаимодействия на основе решения уравнения Дирака для $3d$ -магнетиков вносит изменение в кинетическую энергию электронов, по порядку величины сравнимое с учетом неколлинеарности магнитной структуры.

Известно, что локальное приближение спиновой плотности для обменно-корреляционной энергии дает в большей или меньшей степени заниженное по сравнению с экспериментальным значение равновесной решеточной константы. Попытки выйти за рамки локального приближения предпринимались ранее неоднократно, и одна из последних реализаций, получившая название обобщенной градиентной аппроксимации (ОГА) [26], использована нами в данной работе при проведении зонного расчета ГЦК-Fe. Применение ОГА для железа в сочетании с полнопотенциальной *ab initio* зонной методикой линейных присоединенных плоских волн позволило авторам работы [27] впервые надежно вычислить абсолютный минимум полной энергии, отвечающий ферромагнитному состоянию с ОЦК-структурой. Практически все предшествующие расчеты в локальном приближении плотности давали минимум полной энергии для ГЦК-Fe на 4–7 mRy ниже, чем для ОЦК-структуры [24,28].

Представляемый расчет ГЦК-железа был выполнен методом ПП-ЛМТО в скалярно-релятивистском приближении с включением одной энергетической панели для валентных электронов. Зарядовая плотность электронов внутренних оболочек пересчитывалась на каждой итерации процедуры самосогласования. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось с использованием в ее неприводимой части 72 специальных k -точек. Хорошую сходимость обеспечивал двойной набор базисных орбиталей с фиксированными и оптимально удаленными значениями κ (κ^2 — среднее значение кинетической энергии электрона в междоузельной области). Максимальные значения углового момента l в разложениях по сферическим гармоникам базисных функций внутри и вне МТ-сфер, а также при разложении кристаллического потенциала и зарядовой плотности подбирались таким образом, чтобы дальнейшее увеличение l не сказывалось на вычисленной полной энергии.

Результат расчета полной энергии ГЦК-Fe методом ПП-ЛМТО с использованием ОГА и без нее (в последнем случае локального приближения электронной плотности применялись обменно-корреляционные потенциалы Хедина–Лундквиста [29] и Сеперли–Алдера [30]) иллюстрируют данные табл. 1.

Таблица 1. Рассчитанные структурные свойства ГЦК-Fe с обменно-корреляционными потенциалами Хедина–Лундквиста (H-L) и Сеперли–Алдера (C-A) в локальном приближении для плотности, а также с использованием ОГА (GGA) в сравнении с некоторыми экспериментальными и теоретическими данными

Метод расчета	a_{eq} , а.у.	B_0 , Mbar	E_{total} , Ry	E_{coh} , Ry
Эксперимент [28]	6.78			
FP-LAPW(C-A)	6.38	3.44	-2541.200	
FP-LMTO(H-L)	6.485	3.11	-2540.5314	0.703
FP-LMTO(C-A)	6.482	3.30	-2541.1032	0.733
FP-LMTO(GGA)	6.623	2.54	-2545.6444	0.612

Примечание. a_{eq} — равновесная постоянная решетки, E_{total} — соответствующая ей полная энергия, B_0 — объемный модуль сжатия, E_{coh} — энергия когезии.

Анализируя эффект введения ОГА, отметим следующее. Во-первых, положение минимума на кривой изменения удельной энергии смещается в сторону экспериментального значения равновесного объема V_0 , который соответствует значению постоянной решетки $a_0 = 6.78$ а.у. Во-вторых, минимум полной энергии при включении ОГА существенно опускается. В табл. 1 кроме равновесной решеточной константы и полной энергии приведены также вычисленные нами энергия когезии (в пренебрежении колебаниями решетки при нулевой температуре) и объемный модуль сжатия B_0 в сопоставлении с расчетными данными [28]. К сожалению, в работе [22], которая выполнена в той же модели, что и настоящая работа, не указаны теоретические равновесные значения постоянной решетки и B_0 γ -Fe. Для наблюдаемого значения удельного объема ГЦК-железа результаты расчета объемного модуля сжатия настоящей работы и [22] практически совпадают. Форма кривой $E_{\text{total}}(V/V_0)$, рассчитанной с использованием ОГА, такова, что дает заметно заниженные значения объемного модуля сжатия и энергии когезии по сравнению с расчетами в локальном приближении для электронной плотности. Крайне скудный экспериментальный материал по γ -Fe не позволяет сделать окончательный вывод в пользу подхода ОГА при расчете электронных состояний ГЦК-структуры. Отметим, что поиск оптимальной формы ОГА с целью вычисления свойств основного состояния, особенно в случае магнитоупорядоченных материалов, продолжается [31].

2. Расчет ангармонических фононных частот в искаженной ГЦК-решетке железа

Вычислив равновесное значение параметра решетки a_{eq} ГЦК-железа, построим для него суперячейку, состоящую из восьми атомов. Координаты ато-

мов в единицах a_{eq} приведены в табл. 2. Колебательную моду, отвечающую W -фонону, в точке $k = (2\pi/a)(0.5, 1, 0)$ зоны Бриллюэна можно определить через искаженную ячейку с четырьмя смещенными атомами. Обозначенные в табл. 2 смещения отвечают поперечным колебаниям в плоскости, перпендикулярной оси z .

Кривая изменения полной энергии суперячейки ГЦК-железа относительно амплитуды u_q выбранной нормальной W -моды поперечных колебаний изображена на рис. 1 (расчетные значения ΔE обозначены точками). При вычислении полной энергии восьмиатомной ячейки использовались обменно-корреляционный потенциал Сеперли–Алдера и полученная нами равновесная постоянная ГЦК-решетки $a_{\text{eq}} = 6.482$ а.у. Детали расчета методом ПП-ЛМТО остались прежними. Но в силу понижения симметрии задачи при искажении ГЦК-решетки интегрирование по неприводимой части зоны Бриллюэна проводилось по 80 специальным точкам k . Мы исследовали важный методический вопрос о выборе радиусов МТ-сфер r_{MT} . Величины перекрывающихся МТ-радиусов должны быть такими, чтобы обеспечить свободу атомных смещений в ячейке. При этом относительный объем МТ-сфер по отношению к объему ячейки должен оставаться большим, и можно было обойтись без использования пустых сфер. В данном расчете для всех атомов Fe выбиралось $r_{\text{MT}} = 2.2$ а.у. Соответствующая доля объема МТ-сфер от объема ячейки составила 0.61. Уменьшение МТ-радиусов приводит к заметной потере точности вычислений полной энергии и сил. Поэтому расчет полной энергии не был проведен для значений параметра u_q , больших чем 0.05 в единицах постоянной решетки ГЦК-структуры.

Чтобы вычислить частоту нормальной моды методом "замороженных фононов", необходимо определить зависимость полной энергии системы от амплитуды атомных смещений, отвечающих этой моде. Для малых атомных смещений изменение полной энергии может быть представлено рядом по степени амплитуды u_q . В гармоническом приближении со-

Таблица 2. Позиция атомов Fe в тетрагональной суперячейке в единицах постоянной решетки кубической структуры

Атом	x	y	z
1	0.0	0.0	0.0
2	1.0	0.0	0.0
3	0.0	0.5	0.5
4	1.0	0.5	0.5
5	$1.5 - u_x$	$0.5 + u_y$	0.0
6	$1.5 + u_x$	$1.0 - u_y$	0.5
7	$0.5 + u_x$	$0.5 - u_y$	0.0
8	$0.5 - u_x$	$0.0 + u_y$	0.5

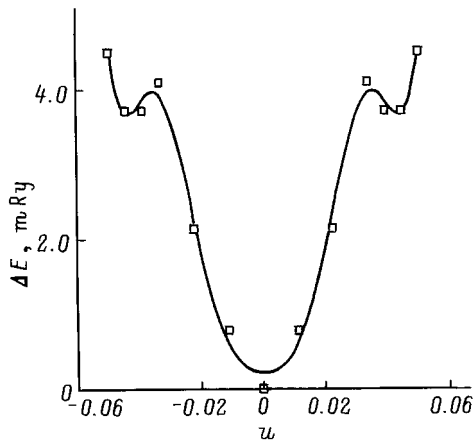


Рис. 1. Зависимость полной энергии системы от амплитуды смещения атомов u_q в (ед. постоянной решетки) для поперечных колебаний нормальной W -моды.

храняется только квадратичный член такого ряда, и частота фонона выражается через соответствующий коэффициент (K_2)

$$\omega_q = (K_2/M)^{1/2}, \quad (1)$$

где M — приведенная масса.

Для ангармонической моды следует включить в рассмотрение члены более высоких степеней разложения полной энергии по амплитуде атомных смещений. Фононная частота при этом зависит от кинетической энергии осциллятора (температуры системы). Такая ситуация реализуется в рассматриваемом случае W -фонона (рис. 1). Особо отметим наличие максимума зависимости $\Delta E(u_q)$ при $u_q \approx 0.02$. Высота энергетического барьера меньше, чем температурный интервал, в котором существует высокотемпературная фаза γ -Fe ($T \sim 900 - 1000$ К). При этих температурах колебания не могут быть локализованы ни в локальной, ни в глобальной потенциальных ямах, изображенных на рис. 1. И следовательно, частоты колебаний не определяются поведением кривой ΔE вблизи дна потенциальных ям. Поскольку движение атомов в рассматриваемой моде должно быть ограниченным, естественно предположить, что при больших амплитудах смещений функция ΔE возрастает. На рис. 1 сплошной кривой изображена аппроксимация вычисленных значений ΔE полиномом десятой степени

$$U(r) = ar^2 - br^4 + cr^6 - dr^8 + er^{10}. \quad (2)$$

При выбранных значениях параметра ($a, b, c, d, e > 0$) этот потенциал вполне удовлетворительно описывает поведение ΔE в области u_q , в которой проведены численные расчеты.

Чтобы продемонстрировать разумность следанного предположения, рассмотрим температурную зависимость эффективной частоты колебаний фононной

моды, эффективный решеточный потенциал для которой представим в виде (2). Для учета ангармонических эффектов будем пользоваться псевдогармоническим приближением [32]. В соответствии с этим приближением движение частицы в ангармоническом потенциале $U(r)$ может быть описано как гармоническое, но в другом (эффективном) потенциале $\tilde{U}(r)$

$$\tilde{U}(r) = \exp(\langle u^2 \rangle / (2\partial^2 / \partial r^2)) U(r), \quad (3)$$

который зависит от температуры через коррелятор среднеквадратичного смещения $\langle u^2 \rangle$ из положения равновесия. Выбрав некоторое приближение для нахождения коррелятора $\langle u^2 \rangle$, получаем самосогласованную систему уравнений для нахождения температурной зависимости эффективной частоты $\omega(T)$.

На рис. 2 показана зависимость $\omega^2(T)/\omega_0^2$, рассчитанная в классическом пределе высоких температур ($\langle u^2 \rangle = T/M\omega^2(T)$, ω_0 — частота при $T = 0$). Такая T -зависимость частоты фононной моды, ответственной за структурный фазовый переход, качественно соответствует экспериментально наблюдаемой [33]. В нашей модели точка минимума зависимости $\omega^2(T)$ соответствует переходу осциллятора из возбужденного состояния (надбарьерные колебания) к базисному (колебания, локализованные в глобальной потенциальной яме) [32]. Полученная линейная зависимость $\omega^2(T)$ при высоких температурах является универсальной характеристикой для систем, претерпевающих структурный фазовый переход [34].

Таким образом, хотя в рамках традиционного псевдогармонического приближения нельзя рассчитывать на количественное описание процесса, особенно вблизи фазового перехода, тем не менее полученный результат позволяет нам дать новую интерпретацию структурного фазового перехода как перехода соответствующей фононной моды из возбужденного состояния в базисное. Обычная интерпретация структурных фазовых переходов [35] на основе построения из первых принципов двухъямного потенциала [36] ограничивается расчетом фононных частот вблизи

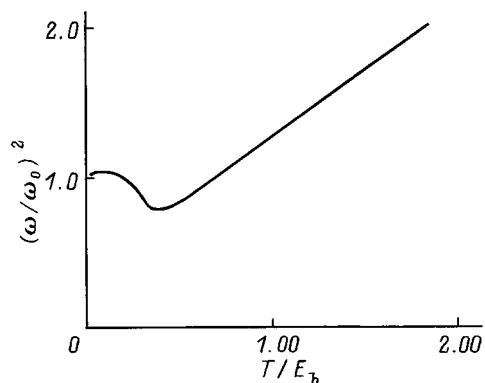


Рис. 2. Зависимость эффективной частоты поперечных колебаний нормальной W -моды от температуры, выраженной в единицах высоты энергетического барьера E_b .

глобального и локального минимумов. Мы надеемся, что использование модифицированного псевдогармонического приближения [37], позволяющего описать поведение системы вблизи фазового перехода, позволит нам получить и количественные оценки перехода $\gamma - \alpha$ -железа.

Отсутствие экспериментального материала по фононам для высокотемпературной γ -фазы железа не позволяет провести детальное сопоставление с результатами нашего исследования. Напомним, что подобная экспериментальная работа для β -Zr [38] послужила недавно мощным стимулом для новых теоретических исследований [1,39] элементов этой группы. Однако мы надеемся, что предложенный подход описания динамики решетки вблизи структурной неустойчивости с учетом ангармонизма системы может оказаться весьма перспективным.

Авторы признательны М. Метфесселю за предоставление программы ПП-ЛМТО и консультации при изучении этой расчетной схемы, а также А. Постникову, Г. Синько, А. Кутепову и В. Трубицыну за полезные дискуссии. Один из авторов (С.О.) благодарит Международный центр теоретической физики (ICTP, Trieste) за гостеприимство и предоставление вычислительных ресурсов.

Список литературы

- [1] С.В. Вонсовский, М.И. Кацнельсон, А.В. Трефилов. ФММ **76**, 3, 3, (1993).
- [2] F. Ducastelle. Order and Phase Stability in Alloys. Cohesion and Structure / Ed. F. de Boer and D. Pettifor. North-Holland, Amsterdam (1991). V. 3.
- [3] T. Kraft, P.M. Marcus, M. Methfessel, M. Scheffler. Phys. Rev. **B48**, 5886 (1993).
- [4] P.E.A. Turchi, L. Reinhard, G.M. Stocks. Phys. Rev. **B50**, 15542 (1994).
- [5] В.Г. Вакс. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. Наука, М. (1973). 328 с.
- [6] В.Л. Аксенов, Н.М. Плакида, С. Стаменкович. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. Энергоатомиздат, М. (1984). 255 с.
- [7] R. Car, M. Parinello. Phys. Rev. Lett. **55**, 2471 (1985); I. Stich, R. Car, M. Parinello. Phys. Rev. **B44**, 11092 (1991); M.P. Grambuch, D. Hohl, R.M. Martin, R. Car. J. Phys.: Cond. Matter **6**, 1999 (1994).
- [8] L. Kleinman, D.M. Bylander. Phys. Rev. Lett. **48**, 1425 (1982); D.R. Hamann. Phys. Rev. **B40**, 2980 (1989).
- [9] P.E. Blochl. Phys. Rev. **B50**, 17953 (1994).
- [10] В.В. Немешкаленко, В.Н. Антонов. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов. Наук. думка, Киев (1985). 408 с.
- [11] P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [12] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [13] Theory of Inhomogeneous Electron Gas / Ed. S. Lundqvist, N.H. March; Пер. под ред. Д.А. Киржница и Е.Г. Максимова. Мир, М. (1987).
- [14] H. Wendel, R.M. Martin. Phys. Rev. **B19**, 5251 (1979); P.K. Lam, M.L. Cohen. Phys. Rev. **B25**, 6139 (1982); K.-M. Ho, C.L. Fu, B.N. Harmon. Phys. Rev. **B29**, 1575 (1984).
- [15] Н.Е. Зейн. ФТТ **26**, 3024 (1984); S. Baroni, P. Gianozzi, A. Testa. Phys. Rev. **58**, 1861 (1987).
- [16] S.Yu. Savrasov, D.Yu. Savrasov. Phys. Rev. **B46**, 12181 (1992).
- [17] С.Ю. Саврасов, Е.Г. Максимов УФН **165**, 773 (1995).
- [18] M. Methfessel. Phys. Rev. **B38**, 1537 (1988); M. Methfessel, C.O. Rodriguez, O.K. Andersen. Phys. Rev. **B40**, 2009 (1989).
- [19] С.А. Останин, Е.И. Саламатов, В.Г. Чудинов. ФТТ **37**, 7, 2002 (1995).
- [20] В.Г. Пушкин, В.В. Кондратьев. ФММ **78**, 5, 40 (1994).
- [21] V.P. Dmitriev, Yu.M. Gufan, P. Toledano. Phys. Rev. **B44**, 7248 (1991).
- [22] P. Soderlind, J.A. Moriarty, J.M. Wills. Phys. Rev. **B53**, 14063 (1996).
- [23] O.N. Mryasov, A.I. Liechtenstein, L.M. Sandratskii, V.A. Gubanov. J. Phys.: Cond. Matter **3**, 7683 (1991).
- [24] M.Uhl, L.M. Sandratskii, J. Kubler. Phys. Rev. **B50**, 291 (1994).
- [25] S.A. Ostanin, V.P. Shirokovskii. J. Phys.: Cond. Matter **4**, 479 (1992); S.A. Ostanin, V.P. Shirokovskii. J. Magn. Magn. Mater. **135**, 135 (1994).
- [26] J.P. Perdew, Y. Wang. Phys. Rev. **B46**, 13244 (1992); J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais. Phys. Rev. **B46**, 6671 (1992).
- [27] D.J. Singh, W.E. Pickett, H. Krakauer. Phys. Rev. **B43**, 11628 (1991).
- [28] C.S. Wang, B.M. Klein, H. Krakauer. Phys. Rev. Lett. **54**, 1852 (1985).
- [29] L. Hedin, B.I. Lundqvist. J. Phys. **C4**, 2064 (1971).
- [30] D.M. Ceperley, B.J. Alder. Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [31] P. Dufek, P. Blaha, K. Schwarz. Phys. Rev. **B50**, 7279 (1994).
- [32] Е.И. Саламатов. ФТТ **34**, 7, 2134 (1992); Е.И. Саламатов. Phys. Stat. Sol. (b) **177**, 75 (1993).
- [33] A. Zheludev et al. Phys. Rev. **B51**, 11310 (1995).
- [34] А. Брус, Р. Каули. Структурные фазовые переходы / Пер. с англ. Мир. М. (1984).
- [35] J.A. Krumhansl, R.G. Gooding. Phys. Rev. **B39**, 3047 (1989).
- [36] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D. Joannopoulos. Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).
- [37] Е.И. Саламатов. Phys. Stat. Sol. (b). In press (1996).
- [38] W. Petry. Phase Trans. **B31**, 119 (1991).
- [39] I. Bakonyi, H. Ebert, A.I. Liechtenstein. Phys. Rev. **B48**, 7841 (1993); R. Ahuja, J. Wills, B. Johansson, O. Eriksson. Phys. Rev. **B48**, 16269 (1993).