

Влияние вырождения d -уровня и эффекта Яна-Теллера на электронную структуру манганитов в приближении сильной связи

© С.М. Дунаевский

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Российской академии наук, 188350 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

E-mail: dunaevsk@mail.pnpi.spb.ru

(Поступила в Редакцию 18 апреля 2001 г.)

В рамках метода сильной связи проведен расчет дисперсионных кривых $E(\mathbf{k})$ носителей заряда в перовскитах типа LaMnO_3 для основных типов скошенного антиферромагнитного упорядочения подрешетки Mn. Расчет спектра $E(\mathbf{k})$ антиферромагнитных структур впервые выполнен с учетом вырождения e_g -уровня марганца и ян-теллеровских искажений кубической структуры перовскита, что потребовало диагонализации матриц гамильтониана восьмого порядка. Получены аналитические выражения для функции $E(\mathbf{k})$ в отдельных точках и на отдельных линиях соответствующей зоны Бриллюэна. Выполненные расчеты показали, что в системе $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ не может быть "электрон-дырочной" симметрии свойств.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 00-02-16729 и 00-02-81205 Бел2000-а.

Легированные манганиты $\text{R}_{1-x}\text{L}_x\text{MnO}_3$ ($\text{R} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$; $\text{L} = \text{Ca}, \text{Ba}, \text{Sr}$) в настоящее время являются объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, направленных на изучение их уникальных физических свойств (колоссальное магнитосопротивление, переход металл–изолятор, зарядовое упорядочение и пр.) [1]. Сейчас стало очевидным, что для правильного описания фазовых диаграмм и транспортных свойств манганитов необходимо наряду со спиновыми и зарядовыми степенями свободы учитывать и дополнительную степень свободы, связанную с двукратным орбитальным вырождением e_g -уровня марганца [2,3].

В основе объяснения аномалий электропроводности манганитов вблизи точки Кюри лежит модель "двойного обмена" (double-exchange — DE) Зинера–Андерсона–Хасегавы [4–6], с помощью которой вычисляются зонный спектр $E(\mathbf{k})$ и кинетическая энергия носителей заряда различных магнитных фаз кристаллической структуры перовскита. В рамках DE-модели интеграл перескока t_{ij} между ионами марганца зависит от угла θ между магнитными моментами ближайших ионов Mn^{4+} как $t_{ij} = t \cos(\theta_{ij}/2)$. Для вычисления спектра $E(\mathbf{k})$ определенной магнитной структуры (в манганитах обычно рассматривается только подрешетка марганца) необходимо задать эти углы θ_{ij} и решить соответствующее секулярное уравнение, порядок которого равен произведению числа атомных орбиталей на число неэквивалентных в магнитном отношении ионов марганца.

В настоящее время хорошо известен вид зонной структуры основных магнитных структур манганитов без учета орбитального вырождения (см. [7]) e_g -уровня, а с учетом его двукратного вырождения — только для ферромагнитного (ФМ) состояния подрешетки марганца [8]. К сожалению, результаты, полученные для ФМ-случая, нередко используются [2,9] для расчета кинетической энергии носителей в антиферромагнитных (АФ) струк-

турах и построения фазовых диаграмм легированных манганитов. С точки зрения теории подобный метод расчета спектра не оправдан, поскольку он игнорирует увеличение числа неэквивалентных атомов (размера соответствующего секулярного уравнения) в элементарной ячейке при переходе от ФМ- к АФ-случаю. Поэтому для правильного теоретического анализа полной энергии, а также орбитального, зарядового и спинового упорядочения в рассматриваемых оксидах необходимо рассчитывать $E(\mathbf{k})$ различных АФ-структур с учетом вырождения e_g -уровня, ян-теллеровских (ЯТ) искажений решетки и возможного зарядового упорядочения.

1. Метод расчета

Настоящая работа посвящена расчету спектра $E(\mathbf{k})$ с учетом орбитального вырождения e_g -электронов в манганитах для различных типов магнитного упорядочения (скошенного антиферромагнитного) в системе. Как и в большинстве современных работ, предполагается, что спин носителя всегда ориентируется вдоль локального спина иона марганца, образованного тремя t_{2g} -электронами. Экспериментально установлено несколько основных типов магнитного упорядочения подрешетки марганца в перовскитах: **A** — АФ-упорядочение соседних ФМ-плоскостей (100), наблюдаемое в соединении LaMnO_3 ($\theta_{ij} = \theta_z = \pi$), **G** — АФ-упорядочение ближайших соседей (CaMnO_3 , $\theta_{ij} = \pi$), **C** — АФ-упорядочение в плоскости (100) ($\theta_{ij} = \theta_{xy} = \pi$), **F** — ФМ-упорядочение ($\theta_{ij} = 0$). Для скошенного антиферромагнитного упорядочения угол $\theta_{ij} \neq \pi$. Элементарная ячейка перовскита для случаев **A**, **G** и **C** содержит два неэквивалентных атома марганца. В рамках метода сильной связи с учетом вырождения e_g -уровня для расчета спектра необходимо диагонализировать матрицу гамильтониана, построенную в базисе

восьми блоховских функций. Для случая когда оба угла θ_{xy} и θ_z одновременно отличны от нуля, блоховских комбинаций должно быть как минимум двенадцать. Понятно, что спектр АФ-структур (особенно **G**) нельзя моделировать спектром ФМ-состояния с двумя интегралами перескока, зависящими от θ_{xy} и θ_z , как это было сделано в [2].

В приближении бесконечно большого внутриатомного хундовского обмена, когда внутриатомная энергия много больше интеграла перескока $JS \gg t$, можно ограничиться рассмотрением матриц четвертого порядка и получить аналитические выражения дисперсионных кривых, однако в данной работе рассмотрен общий случай, когда JS сравним с t ($JS \approx 3-5t$). В качестве гамильтониана системы рассматривается гамильтониан двойного обмена

$$H_{DE} = \sum_{i\alpha\sigma} \varepsilon_{i\alpha\sigma} d_{i\alpha\sigma}^+ d_{i\alpha\sigma} + \sum_{ij\alpha\beta\sigma'\sigma} t_{ij\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} \left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right) d_{i\alpha\sigma}^+ d_{j\beta\sigma'} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \quad (1)$$

где

$$t_{ij\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} \left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right) = \begin{cases} t_{\alpha\beta} \cos\left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right), & \sigma = \sigma', \\ \pm t_{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right), & \sigma \neq \sigma', \end{cases}$$

i, j — индексы атомов, α, β — атомные орбитали $|z^2\rangle$ и $|x^2 - y^2\rangle$, $\varepsilon_{i\alpha\sigma}$ — энергия вырожденного d -уровня иона Mn^{3+} типа α ($\alpha = 1, 2$), σ — спиновый индекс, θ_{ij} — угол между локальными магнитными моментами **S** ($S = 3/2$) ближайших ионов Mn^{4+} , $t_{ij\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}$ — интеграл перескока между вырожденными орбиталями ближайших соседей. Значения интеграла перескока зависят от направлений перескока в декартовой системе координат x, y и z и выражаются в виде матриц

$$t_{ij\alpha\beta} \equiv t_{ij}^{\alpha\beta} = -t \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{-\sqrt{3}}{4} \\ \frac{-\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \text{ вдоль оси } x, \\ -t \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \text{ вдоль оси } y, \quad -t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ вдоль оси } z, \quad (2)$$

где

$$\alpha, \beta = |1\rangle = |z^2\rangle, |2\rangle = |x^2 - y^2\rangle, \quad t = \frac{V_{pd\sigma}^2}{E_d - E_p}.$$

Матрицу гамильтониана скошенных антиферромагнитных структур удобно записать в виде

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_1(\mathbf{k}) & H_{12}(\mathbf{k}) \\ \hat{H}_{12}^*(\mathbf{k}) & H_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где матрицы H_1, H_2 описывают взаимодействие между орбиталями одного типа, а матрица H_{12} — между вырожденными орбиталями разного типа. Явный вид матриц

H_i для различных магнитных структур следует из формул, приведенных в работе автора [7]. Так, для структуры **G**-типа имеем

$$H_i(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} E'_{di} - JS & 0 & t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & E'_{di} + J(S+1) & -t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} & -t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} & E'_{di} - JS & 0 \\ t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & E'_{di} + J(S+1) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $t_1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}t(\cos k_x + \cos k_y) - 2t \cos k_z$, $t_2(\mathbf{k}) = -\frac{3}{2}t \times (\cos k_x + \cos k_y)$, $t = \frac{V_{pd\sigma}^2}{\Delta}$, $\Delta = E_d - E_p$.

Здесь $E'_{di} = E_{di} + U \langle n_{-\sigma} \rangle$ — энергии e_g -уровней иона марганца, E_p — энергия p -уровня кислорода, t — эффективный интеграл перехода между орбиталями ближайших ионов марганца, записанный во втором порядке теории возмущений по интегралу перехода Костера–Слетера $V_{pd\sigma}$ между e_g -орбиталью марганца и p -орбиталью ближайшего иона кислорода. Параметр t в манганитах положителен, так как в соответствии с результатами численных кластерных расчетов [10] уровень E_p лежит ниже уровней E_{di} . Поскольку вдоль оси z переход возможен лишь между орбиталями типа $|z^2\rangle$, матрица $H_{12}(\mathbf{k})$, зависит только от перпендикулярной составляющей волнового вектора \mathbf{k}_\perp и имеет вид

$$H_{12}(\mathbf{k}_\perp) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & 0 & -t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & -t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & 0 & 0 \\ t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где

$$t_{12}(\mathbf{k}_\perp) = \frac{\sqrt{3}}{2} t (\cos k_x - \cos k_y).$$

Для структуры **A**-типа получаем

$$H_i(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{E} - JS & 0 & t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & \mathcal{E} + J(S+1) & -t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} & -t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} & \mathcal{E} - JS & 0 \\ t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & \mathcal{E} + J(S+1) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где $E'_{di} + t_i(\mathbf{k}_\perp) = \mathcal{E}$, $t_1(k_z) = -2t \cos k_z$, $t_2(k_z) \equiv 0$, $t_1(\mathbf{k}_\perp) = -\frac{1}{2}t(\cos k_x + \cos k_y)$, $t_2(\mathbf{k}_\perp) = -\frac{3}{2}t \times (\cos k_x + \cos k_y)$.

Формулы (4)–(6) записаны в предположении, что индекс 1 соответствует d -орбитали типа $|z^2\rangle$, а индекс 2 — орбитали $|x^2 - y^2\rangle$. Из (6) следует, что $H_2(\mathbf{k})$ для структуры **A**-типа имеет диагональный вид. Очевидно, что в этом случае и матрица $H_{12}(\mathbf{k})$ будет иметь диагональный вид $H_{mn}(\mathbf{k}_\perp) = t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \delta_{mn}$ ($m, n = 1-4$).

Для структуры С-типа имеем

$$H_i(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \bar{\mathcal{E}} - JS & 0 & t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & \bar{\mathcal{E}} + J(S+1) & -t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & -t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & \bar{\mathcal{E}} - JS & 0 \\ t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & \bar{\mathcal{E}} + J(S+1) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $E'_{di} + t_i(\mathbf{k}_z) = \bar{\mathcal{E}}$. Матрица $H_{12}(\mathbf{k}) = H_{12}(\mathbf{k}_\perp)$ совпадает с аналогичной матрицей структуры G-типа.

2. Результаты и их обсуждение

На основе полученных выражений (3)–(7) были рассчитаны дисперсионные кривые для различных скошенных антиферромагнитных структур как без учета, так и с учетом статических ЯТ-искажений идеальной кубической структуры решетки перовскита. Эти искажения приводят к появлению различных значений интеграла переноса вдоль различных направлений и расщепляют уровни E_{d1} и E_{d2} . Зависимость интегралов переноса (параметра $V_{pd\sigma}$) от расстояния, которая определялась по Харрисону [11], фактически не влияет на результаты расчета дисперсионных кривых. Наиболее важным результатом ЯТ-искажений является расщепление e_g -уровня. При достижении определенного критического значения этого расщепления в нижней вырожденной зоне магнитной структуры А-типа (LaMnO_3) возникает диэлектрическая щель. Без учета ЯТ-эффекта вырождение e_g -уровня приводит к тому, что А-структура (даже без легирования) всегда является металлом, что противоречит многочисленным экспериментальным данным. Для G-структуры щель возникает при гораздо меньшем значении ЯТ-искажений. Для идеальных структур ($\theta = \pi$) все зоны оказываются двукратно вырожденными. В этом случае для отдельных точек и направлений в зоне Бриллюэна (ЗБ) можно легко получить аналитические выражения дисперсионных кривых $E(\mathbf{k})$. В общем случае проще выполнить численную диагонализацию секулярного уравнения восьмого порядка для произвольных значений угла θ и волнового вектора \mathbf{k} в ЗБ орторомбической решетки. Ввиду малости орторомбических искажений и учета одной лишь марганцевой подрешетки все расчеты проводились для ЗБ кубической решетки (в общепринятых обозначениях работы [8]).

При проведении численных расчетов удобно вычислять $E(\mathbf{k})$ в единицах t . Конкретные значения этого параметра в LaMnO_3 лежат в интервале от величины 0.1–0.15 eV [12], полученной в зонном формализме функционала плотности, до величины ≈ 0.30 eV [10], найденной в формализме функционала плотности для кластера $[\text{La}_4\text{Mn}_2\text{O}_{11}]^{4-}$. Расщепление e_g -уровня в кристаллическом поле на осно-

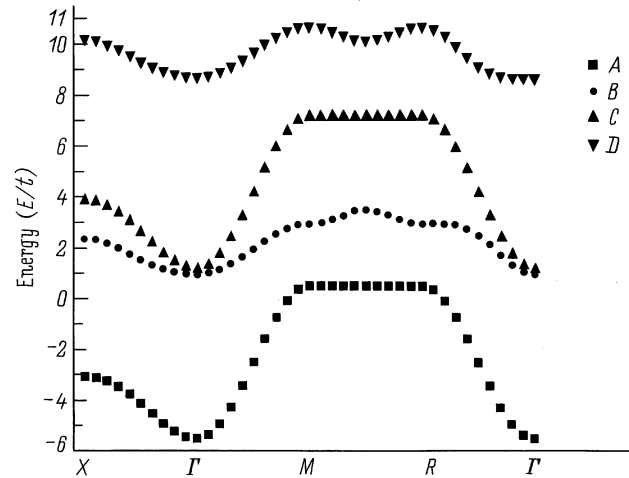


Рис. 1. Спектр антиферромагнитной структуры А-типа для основных симметричных направлений зоны Бриллюэна, рассчитанный при следующих значениях параметров: $\theta = \pi$, $J = 1.67t$, $E_{d1} = 5t$, $E_{d2} = 0$. Все зоны (A, B, C, D) двукратно вырождены.

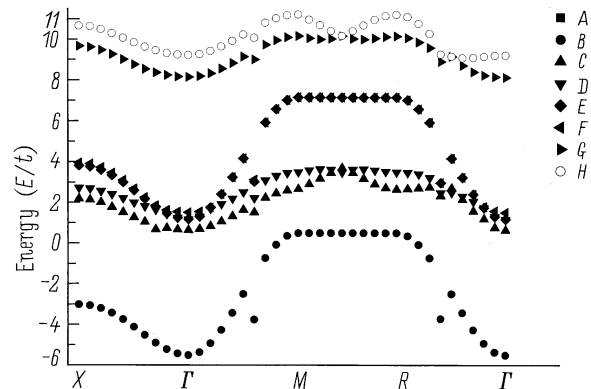


Рис. 2. Спектр скошенной антиферромагнитной структуры А-типа, рассчитанный при $\theta = 0.8\pi$, $J = 1.67t$, $E_{d1} = 5t$, $E_{d2} = 0$. Зоны, отмеченные индексами A, B и E, F и отвечающие орбиталям $|x^2 - y^2\rangle$, в данных симметричных направлениях практически совпадают, поэтому на рисунке различаются всего шесть зон.

вании кластерных расчетов составляет $E_{d1} - E_{d2} = 0.3 - 0.5$ eV [10], а из оптических данных [13] следует, что $E_{d1} - E_{d2} = 1$ eV. Параметр $J \approx 0.25$ eV был получен автором в результате проведения хартри-фоковских расчетов электронной структуры иона Mn^{3+} с использованием известного комплекса программ RAINE [14]. Этот параметр определялся для $S = 3/2$ из соотношения $J(2S + 1) = E_{\text{tot}}[\text{Mn}^3(S = 2)] - E_{\text{tot}}[\text{Mn}^{3+}(S = 1)] \approx 0.97$ eV, где E_{tot} — полная энергия иона Mn^{3+} в соответствующем спиновом состоянии. Атомная оценка практически совпадает с зонной оценкой [12], где разность этих энергий равна ≈ 0.9 eV.

На рис. 1 представлен спектр АФ-структуры А-типа, рассчитанный при следующих значениях параметров:

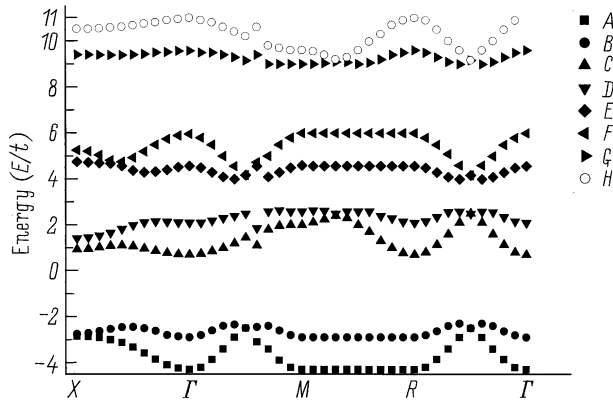


Рис. 3. Спектр скошенной антиферромагнитной структуры **G**-типа, рассчитанный при тех же значениях параметров, что и на рис. 2. В данной магнитной структуре вырождение зон возникает только в отдельных точках зоны Бриллюэна. Аналогичный по форме спектр имеет и антиферромагнитная **C**-структура.

$\theta = \pi$, $J = 1.67t$, $E_{d1} = 5t$, $E_{d2} = 0$, $S = 3/2$. По форме он достаточно хорошо совпадает с участком спектра вблизи уровня Ферми, рассчитанным в приближении LDA (local density approximation) [12]. Для **A**-типа на элементарную ячейку рассматриваемой структуры приходится два электрона, которые полностью заполняют нижнюю двукратно вырожденную **A**-зону, образованную орбиталями типа 2. Без учета ЯТ-искажений эта зона перекрывается с верхней зоной **B** (типа 1) и соединение является металлом. Щель в спектре возникает лишь тогда, когда ЯТ-искажения достаточны для расщепления d -уровня, превышающего некоторое критическое значение $E_{d1} - E_{d2} \geq 5t$. Аналогичная ситуация имеет место и в [12]. Величина непрямого щели составляет $E_g \approx t \approx 0.1-0.3$ eV, а прямой щели — $2.5t$. Дно верхней незаполненной зоны находится в точке $\Gamma(0, 0, 0)$, а потолок нижней зоны — на линии $M(1/2, 1/2, 0)-R(1/2, 1/2, 1/2)$, что приводит к появлению пика плотности состояний вблизи соответствующей энергии. С ростом расщепления вырожденного уровня может возникнуть перекрытие зон **B** и **C** (типа 2) с разным направлением спина.

На рис. 2 представлен спектр скошенной антиферромагнитной структуры **A**-типа, рассчитанный для угла $\theta = 0.8\pi$. Обращает на себя внимание то, что вдоль приведенных симметричных направлений зоны **A** и **B**, **E** и **F** типа 2 остаются двукратно вырожденными. Расщепляются лишь зоны типа 1 (**C**, **D**, **G** и **H**). Полное расщепление зон возникает в произвольных несимметричных точках ЗБ, но, как показывают расчеты, оно невелико. Так, в направлении $\Gamma-X$ расщепление нижней зоны равно $\approx 0.05t$ и на рисунке не показано. Однако из рисунка хорошо видно перекрытие зон **C**, **D** (типа 1) и **E**, **F** (типа 2) с разным направлением спина.

Результаты расчета спектра скошенной **G**-структуры при тех же значениях параметров, что и на рис. 2, представлены на рис. 3. Здесь вырождение возникает только в отдельных точках на симметричных линиях ЗБ. Основной особенностью спектра является очень сильное сужение нижних зон **G**-структуры. Из рис. 2, 3 видно, что при одних и тех же параметрах полная ширина этих зон (не заполненных для CaMnO_3) примерно в 4 раза меньше соответствующего значения для спектра **A**-структуры.

Аналогичным образом был рассчитан и спектр скошенной **C**-структуры. Поскольку этот спектр по своей форме и положению близок к спектру **G**-структуры, в настоящей работе он не приводится. Для симметричных линий спектр **C**-структуры легко получить аналитически при $\theta = \pi$.

Таким образом, как следует из стандартной DE-модели, поведение систем типа $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ при малых x и $x \approx 1$ должно быть подобным ("электрон-дырочная" симметрия). Эксперимент показывает, что дырочные и электронные соединения ведут себя совершенно различным образом. Так, при $x < 0.5$ обычно возникает металлическое ФМ-состояние, а при $x > 0.5$ — диэлектрическая фаза. Результаты настоящей работы позволяют дать качественное объяснение эксперимента. Из результатов численных расчетов следует, что при легировании CaMnO_3 (структура **G**-типа) подвижность носителей (электронов) будет меньше подвижности дырок, которые возникают при легировании LaMnO_3 (структура **A**-типа). Поэтому "электрон-дырочной" симметрии свойств $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ наблюдаться не может. Чтобы подобная симметрия наблюдалась, необходимо иметь исходный электронный спектр, в котором форма изоэнергетических поверхностей для дырок вблизи потолка валентной зоны совпадала бы с формой изоэнергетических поверхностей для электронов вблизи дна зоны проводимости. Выполненные в данной работе расчеты показывают, что такой ситуации ни для одной из рассмотренных основных магнитных структур быть не может. В экспериментах "электрон-дырочной" симметрии также не наблюдается, о чем свидетельствуют многочисленные фазовые диаграммы манганитов (см. [1]).

Результаты расчета магнитной фазовой диаграммы манганитов на основе полученной электронной структуры предполагается опубликовать в отдельной работе.

Список литературы

- [1] Colossal Magnetoresistance, Charge Ordering and Related Properties of Manganese Oxides/Ed. C.N.R. Rao and B. Raveau. World Scientific, Singapore (1998).
- [2] J. van den Brink, D. Khomskii. Phys. Rev. Lett. **82**, 1016 (1999).
- [3] T. Mizokava, D.I. Khomskii, G.A. Sawatzky. Phys. Rev. **B63**, 024 403 (2001).
- [4] P.W. Anderson, H. Hasegawa. Phys. Rev. **100**, 675 (1955).

- [5] E. Muller-Hartmann, E. Dagotto. Phys. Rev. **B54**, R6819 (1996).
- [6] K. Kubo, N. Ohata. J. Phys. Soc. Jpn. **33**, 21 (1972).
- [7] С.М. Дунаевский. ФТТ **41**, 12, 2179 (1999).
- [8] H. Shiba, R. Shina, A. Takahashi. J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 941 (1997).
- [9] G. Venketeswara Pai. Phys. Rev. **B63**, 064 431 (2001).
- [10] J.W. Liu, Z. Zeng, Q.Q. Zheng, H.Q. Lin. Phys. Rev. **B60**, 12 968 (1999).
- [11] У. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел. Мир, М. (1983). Т. 1. 381 с.
- [12] S. Satpathy, Z.S. Popović, F.R. Vukajlović. Phys. Rev. Lett. **76**, 960 (1996).
- [13] M. Quijada, J. Černe, J.R. Simpson, H.D. Drew, K.H. Ahn, A.J. Millis, R. Shreekala, R. Ramesh, M. Rajeswari, T. Venkatesan. Phys. Rev. **B58**, 16 093 (1998).
- [14] I.M. Band, M.B. Trzhaskovskaya. Atom. Data Nucl. Data Tabl. **35**, 3 (1986).