

Самосогласованный расчет зонной структуры соединений TiN, Ti_{0.75}Zr_{0.25}N, Ti_{0.25}Zr_{0.75}N, ZrN линейным методом присоединенных слэтеровских орбиталей

© Н.Г. Якутович, Н.Н. Дорожкин, В.М. Анищик, Б.В. Новыш*

Белорусский государственный университет,
220080 Минск, Белоруссия

* Институт физики твердого тела и полупроводников,
220072 Минск, Белоруссия

E-mail: yakutovich@phys.bsu.unibel.by

(Поступила в Редакцию 26 ноября 1999 г.
В окончательной редакции 10 апреля 2000 г.)

Выполнено теоретическое исследование физических свойств стехиометрических соединений ряда Ti–Zr–N, включающее в себя расчет электронной структуры с помощью линейного метода присоединенных слэтеровских орбиталей, а также расчет объемных модулей упругости всестороннего сжатия и определение равновесной постоянной решетки. Результаты работы могут использоваться при определении фаз данных материалов, используемых в качестве защитных покрытий.

Одной из важнейших задач современного материаловедения являются разработка и исследование новых технологических материалов, обладающих уникальными физическими свойствами при сравнительно невысокой стоимости. Большое внимание уделяется материалам, перспективным для создания защитных покрытий. Обычно защитные покрытия содержат такие металлы, как Ti, Mo, Cr, Zr, имеющие большое число *d*-электронов и образующие с металлоидами, входящими в покрытие, выраженные ковалентные связи. Получаемые соединения обладают высокой прочностью и температурой плавления. Двойные системы типа Me–X (где Me — один из *d*-металлов, X — металлоид) исследованы уже достаточно хорошо. В настоящее время активно исследуются тройные и более сложные соединения.

Расчеты энергетической зоны структуры составляют базис теоретического исследования физико-химических свойств материалов. Для расчета электронной структуры кристаллических твердых тел развито большое количество различных методов [1–3], имеющих свои достоинства и недостатки. Так, традиционные методы присоединенных плоских волн (APW) и Корринги–Кона–Ростокера (KKR) имеют высокую точность, но не эффективны по скорости счета, и их трудно применять в самосогласованных расчетах для сложных кристаллических систем с большим числом атомов в элементарной ячейке. Линейные методы (LAPW, LMTO и т.п.) имеют высокое быстродействие за счет некоторого снижения точности расчетов и активно применяются в расчетах электронной структуры и физических свойств самых разнообразных твердых тел с любой кристаллической структурой и любым типом химической связи. Предел скорости расчетов определяется доступными вычислительными мощностями. На суперкомпьютерах возможен расчет электронной структуры систем с несколькими сотнями атомов в элементарной ячейке. Ясно, что такие расчеты требуют применения высокоточных и эффектив-

ных методов. Одним из таких является метод линейных присоединенных слэтеровских орбиталей (LASTO), развитый в работах [4–7]. Например, этот метод был использован для теоретической интерпретации результатов рентгеновских спектров поглощения и объяснения ближнего порядка в сплавах Au–Ta [8].

До настоящего времени в печати не приводился формализм метода LASTO для произвольного числа атомов в элементарной ячейке. Чтобы восполнить этот пробел, мы приводим в приложении все выражения, необходимые для расчетов зонной структуры кристаллических твердых тел с произвольным базисом.

В методе LASTO [4–7] волновая функция представляется в виде

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = \sum_N c_N \psi_N(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где

$$\psi_N(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}_\nu} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\nu} \phi_{nlm}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_i - R_\nu), \quad (2)$$

$N = \{i, nlm\}$ — позиция *i*-го атома в элементарной ячейке, R_ν — вектор решетки, а $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$ — слэтеровская орбиталь вне МТ сфер и точное решение уравнения Шредингера внутри МТ сфер, сшитые на границе МТ сфер,

$$\phi_{nlm}(\mathbf{r}) = A_n r^{n-1} e^{-\xi r} Y_{lm}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

$$A_n = (2\xi)^{n+\frac{1}{2}} [(2n)!]^{-\frac{1}{2}}. \quad (4)$$

Фурье-образ слэтеровской орбитали известен и имеет простой вид

$$\phi_{nl}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{\Omega} (i)^{-l} Y_L(\mathbf{r}) \int_0^\infty dr j_l(qr) r^{n+1} \exp(-\xi r), \quad (5)$$

где Ω — объем примитивной элементарной ячейки, а интеграл в (5) легко берется в аналитическом виде.

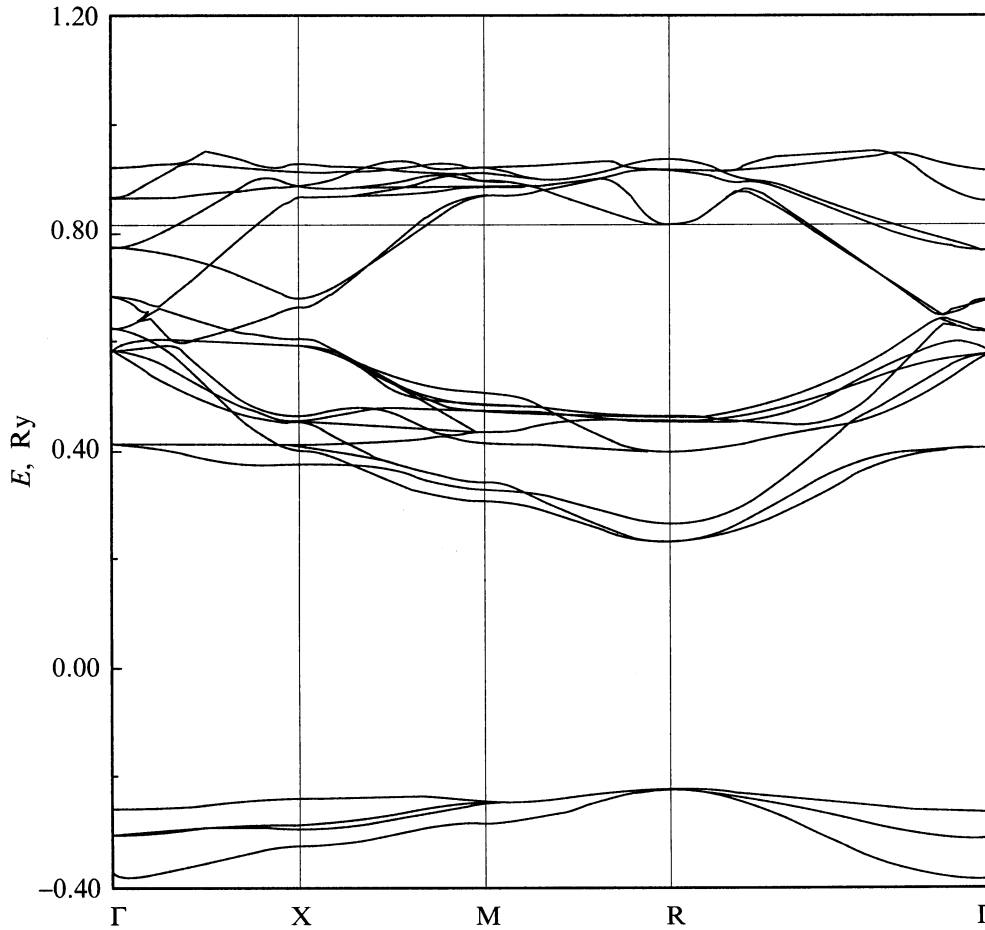


Рис. 1. Зонная структура $Zr_{0.25}Ti_{0.75}N$.

С учетом приведенных соотношений функция $\psi_N(\mathbf{r})$ может быть переписана в следующем виде:

$$\psi_N(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{T}_i} \phi_{nL}(\mathbf{q}), \quad (6)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{g}$. Функция $\psi(\mathbf{r})$ в виде (2) используется только вне МТ сфер, а внутри МТ сфер используется численное решение радиального уравнения Шредингера. Внутри j -й сферы базисная функция выбирается в виде линейной комбинации радиальных волновых функций $g_{j\lambda}(\mathbf{r}_j)$ и их энергетических производных $\dot{g}_{j\lambda}(\mathbf{r}_j)$,

$$\psi_N(\mathbf{r}) = \sum_{\Lambda} [\beta_{N,j\Lambda} g_{j\lambda} + \alpha_{N,j\Lambda} \dot{g}_{j\lambda}(\mathbf{r}_j)] Y_{\Lambda}(\mathbf{r}_j), \quad (7)$$

где коэффициенты $\beta_{N,j\Lambda}$ и $\alpha_{N,j\Lambda}$ определяются из условия сшивки базисных функций на поверхности МТ сфер.

Матричные элементы гамильтониана H и матрицы перекрытия S определяются стандартным образом

$$H_{NN'} = \int \psi_N^*(\mathbf{r}) H \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

$$S_{NN'} = \int \psi_N^*(\mathbf{r}) \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (9)$$

Явный вид матричных элементов дан в Приложении.

В данной работе приводятся результаты расчетов для ряда соединений системы (Ti-Zr)N, позволяющих получить также их некоторые физические свойства. Расчет проводился для соединений TiN, $Zr_{0.25}Ti_{0.75}N$, $Ti_{0.25}Zr_{0.75}N$, ZrN с использованием расширенной элементарной ячейки. Расширенная элементарная ячейка принадлежит простой кубической решетке и содержит восемь атомов. Для соединений TiN и ZrN имеются два типа неэквивалентных атомов, а соединения $Zr_{0.25}Ti_{0.75}N$ и $Ti_{0.25}Zr_{0.75}N$ содержат по четыре типа неэквивалентных атомов металлов и два типа атомов азота. Расчет проводился на 56 векторах в неприводимой части зоны Бриллюэна с обменно-корреляционным потенциалом Барта-Хедина. Полная и частичная плотности состояний вычислялись методом тетраэдров. На рис. 1 приведена зонная структура соединения $Zr_{0.25}Ti_{0.75}N$, рассчитанная по стандартному контуру для простой кубической решетки. Для TiN и ZrN s -зоны, как обычно, имеют трехкратное вырождение в точке Γ , а для $Ti_{0.25}Zr_{0.75}N$ и $Zr_{0.25}Ti_{0.75}N$ происходит отщепление одной зоны и остается только двукратное вырождение. Это можно объяснить появлением другого сорта атомов в эле-

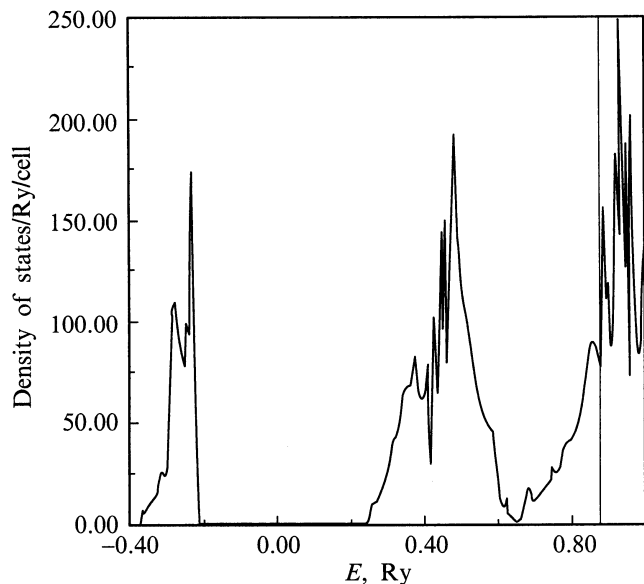


Рис. 2. Плотность состояний Zr_{0.25}Ti_{0.75}N.

ментарной ячейке, которое приводит к понижению ее локальной симметрии. Зоны вблизи уровня Ферми для Zr_{0.25}Ti_{0.75}N более плоские, так как преимущественно заселены *p*-электронами азота по сравнению с аналогичными зонами для ZrN и Ti_{0.25}Zr_{0.75}N, что связано с достаточно большой примесью *d*-состояний для данных соединений. На рис. 2 приведена полная плотность состояний для соединения Zr_{0.25}Ti_{0.75}N. В целом плотности состояний для всех исследованных соединений аналогичны. Можно выделить три максимума, первый из которых образован *s*-электронами азота. Второй максимум расщеплен на два, которые преимущественно заполнены *p*-электронами металла и *p*-электронами азота. Третий пик возникает в основном за счет *p*- и *d*-электронов металла, и уровень Ферми обычно располагается слева от максимума этого типа. Этот пик для материалов Ti_{0.25}Zr_{0.75}N и ZrN образован приблизительно на 2/3 *p*-электронами азота и металлов и остальные состояния заняты *d*-электронами циркония. Для двух других соединений плотность состояния вблизи уровня Ферми в основном складывается из *p*-состояний азота, а вклад *d*-электронов металлов несуществен. В рамках расчетов зонной структуры были оценены объемные модули упругости данных соединений. Варьируя постоянную решетки для данного соединения и вычисляя давление электронного газа в МТ сферах, можно построить диаграмму состояния $p = p(V)$. Далее модули всестороннего сжатия легко определяются численно по формуле

$$B = V \left(\frac{dp}{dV} \right)_{V=V_0},$$

где V_0 — равновесный объем элементарной ячейки. Самосогласованные зонные расчеты были проведены

для различных постоянных решеток рассматриваемых соединений вблизи равновесного значения для каждого соединения. Результаты расчетов объемных модулей упругости и теоретически рассчитанные равновесные постоянные решеток соединений хорошо согласуются с экспериментальными значениями, и так как данная система образует ряд непрерывных растворов, то значения постоянных решеток почти линейно зависят от концентрации металлов в соединении. Значения рассчитанных равновесных постоянных решеток соединений приведены в таблице.

Рассчитанные значения модулей упругости соединений получились несколько больше, чем в эксперименте [9], что, вероятно, связано с трудностью получения чистых стехиометрических составов. Так, например, в случае TiN может содержаться значительное количество вакансий в подрешетке Ti, которые существенно снижают объемный модуль упругости. То же самое можно сказать и о других соединениях системы (Ti–Zr)N.

В ряде современных работ по методам напыления и исследования защитных покрытий на основе TiN и ZrN [10] проводилось измерение объемных модулей упругости для полученных композитных материалов. Объемные модули упругости рассчитывались из данных по измерению скорости звука в пленочных покрытиях. Модули Юнга для TiN и ZrN приводятся в критическом обзоре [11] и отличаются от рассчитанных не более чем на 10%.

Таким образом, результаты проведенных исследований укзывают на то, что метод может эффективно использоваться для расчетов физических свойств кристаллических веществ. Этот метод можно легко модифицировать и для расчета свойств двухмерных, квазиодномерных, наноразмерных систем, а также и для трехмерных кристаллов с дефектами кристаллической решетки, что представляет несомненный интерес при исследовании имплантированных кристаллов. Метод LASTO обладает высокой точностью и более высокой, по сравнению с линейным методом присоединенных плоских волн, скоростью и может эффективно использоваться для расчетов энергетической зонной структуры тройных стехиометрических соединений. Включение в расчет не-МТ поправок должно способствовать более корректному описанию особенностей химической связи исследуемых соединений.

Равновесные постоянные решетки и объемные модули упругости соединений системы (Ti–Zr)N

Соединение	Постоянная решетки, nm	Объемный модуль упругости, GPa
TiN	0.4180	346.7
Zr _{0.25} Ti _{0.75} N	0.4422	224.0
Ti _{0.25} Zr _{0.75} N	0.4537	194.6
ZrN	0.4557	258.8

Приложение

Матричные элементы гамильтониана можно представить в виде суммы матричных элементов гамильтониана с МТ потенциалом и не-МТ поправок

$$H_{NN'} = H_{NN'}^{MT} + H_{NN'}^{NMT}. \quad (10)$$

В свою очередь не-МТ поправки представляются в виде суммы внутрисферной и межсферной частей

$$H_{NN'}^{NMT} = H_{NN'}^{sp} + H_{NN'}^{out}. \quad (11)$$

Кристаллический потенциал, как обычно, разлагается в ряд Фурье в межсферной области

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{g}\mathbf{r})V(\mathbf{g}) \quad (12)$$

и раскладывается по сферическим гармоникам для МТ сфер

$$V(\mathbf{r}) = \sum_L V_L(r_j)Y_L(\mathbf{r}_j). \quad (13)$$

Можно показать [5], что вклад $H_{NN'}^{sp}$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H_{NN'}^{sp} = & \sum_{\Lambda, \Lambda', L} \int Y_L Y_{\Lambda}^* Y_{\Lambda'} d\hat{r} \left[\beta_{N, j\Lambda}^* \beta_{N', j\Lambda'} \int g_{j\lambda} V_L^j g_{j\lambda'} r^2 dr \right. \\ & + \beta_{N, j\Lambda}^* \alpha_{N', j\Lambda'} \int g_{j\lambda} V_L^j \dot{g}_{j\lambda'} r^2 dr + \alpha_{N, j\Lambda}^* \beta_{N', j\Lambda'} \\ & \left. \times \int \dot{g}_{j\lambda} V_L^j g_{j\lambda'} r^2 dr + \alpha_{N, j\Lambda}^* \alpha_{N', j\Lambda'} \int \dot{g}_{j\lambda} V_L^j \dot{g}_{j\lambda'} r^2 dr \right]. \quad (14) \end{aligned}$$

Определим функцию $\theta(\mathbf{r})$

$$\theta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{в межсферном пространстве,} \\ 0, & \text{вне его.} \end{cases}$$

Тогда Фурье образ этой функции $\theta(\mathbf{g})$ легко определяется [7]

$$\theta(\mathbf{g}) = \delta_{\mathbf{g},0} - \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\gamma} \frac{\exp(-i\mathbf{g}\boldsymbol{\tau}_{\gamma}) R_{\gamma}^3 j_1(gR_{\gamma})}{gR_{\gamma}}. \quad (15)$$

Теперь можно получить выражение для межсферной части не-МТ поправок

$$H_{NN'}^{int} = \Omega \sum_{\mathbf{g}} \phi_N^*(\mathbf{g}) T_i^*(\mathbf{g}) \sum_{\mathbf{g}'} f(\mathbf{g}-\mathbf{g}') \phi_{N'}(\mathbf{g}') T_i(\mathbf{g}'), \quad (16)$$

где $f(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r})$, а $f(\mathbf{g}-\mathbf{g}')$ определяется с помощью быстрого преобразования Фурье.

Получим теперь матричные элементы гамильтониана с МТ потенциалом и матричные элементы матрицы перекрытия. Для этого следует внутри МТ сфер (I) вычислить матричные элементы на функциях (7) с МТ

потенциалом, а интеграл по внешней области (II) заменить интегралом по всему пространству с гамильтонианом $H_{II} = [-\nabla^2 + V_0]$ за вычетом интеграла по МТ сферам с тем же гамильтонианом H_{II} . Запишем матричные элементы в виде суммы трех интегралов

$$H_{NN'}^{MT} = H_1 + H_2 + H_3, \quad (17)$$

$$S_{NN'}^{MT} = S_1 + S_2 + S_3, \quad (18)$$

$$H_1 = N_c \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \psi_N^*(\mathbf{r}) H_I \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (19)$$

$$H_2 = \int_V \psi_N^*(\mathbf{r}) H_{II} \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (20)$$

$$H_3 = -N_c \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \psi_N^*(\mathbf{r}) H_{II} \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (21)$$

Вычислим теперь последовательно каждый интеграл

$$\begin{aligned} H_1 = & N_c \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \psi_N^*(\mathbf{r}) H_I \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = & \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \left(\sum_{\Lambda} [\beta_{N, \nu\Lambda}^* g_{\nu\lambda}(r_{\nu}) + \alpha_{N, \nu\Lambda}^* \dot{g}_{\nu\lambda}(r_{\nu})] Y_{\Lambda}^*(\mathbf{r}_{\nu}) \right) \\ & \times H_I \left(\sum_{\Lambda'} [\beta_{N', \nu\Lambda'} g_{\nu\lambda'}(r_{\nu}) + \alpha_{N', \nu\Lambda'} \dot{g}_{\nu\lambda'}(r_{\nu})] Y_{\Lambda'}(\mathbf{r}_{\nu}) \right) \\ = & \sum_{\nu} \sum_{\Lambda} \epsilon (\beta_{N, \nu\Lambda}^* \beta_{N', \nu\Lambda} + \alpha_{N, \nu\Lambda}^* \alpha_{N', \nu\Lambda} \langle \dot{g}_{\nu\lambda} | \dot{g}_{\nu\lambda} \rangle) \\ & + \beta_{N, \nu\Lambda}^* \alpha_{N', \nu\Lambda} + \alpha_{N, \nu\Lambda}^* \beta_{N', \nu\Lambda}), \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_2 = & \int_V \psi_N^*(\mathbf{r}) [-\nabla^2 + V_0] \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = & \int_V \frac{1}{\sqrt{N_c}} \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{g}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{g})\mathbf{r}} \phi_N^*(\mathbf{g}) T_i^*(\mathbf{g}) \frac{1}{\sqrt{N_c}} \frac{1}{v} \\ & \times \sum_{\mathbf{g}'} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{g})\mathbf{r}} (|\mathbf{k}+\mathbf{g}|^2 + V_0) \phi_{N'}(\mathbf{g}') T_j(\mathbf{g}') d\mathbf{r} \\ = & \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{g}} T_i^*(\mathbf{g}) \phi_N^*(\mathbf{k}+\mathbf{g}) (|\mathbf{k}+\mathbf{g}|^2 + V_0) \phi_{N'}(\mathbf{k}+\mathbf{g}) T_j(\mathbf{g}), \quad (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_3 = & -N_c \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \psi_N^*(\mathbf{r}) [-\nabla^2 + V_0] \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = & \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \psi_N^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - V_0 \sum_{\nu} \int_{\Omega_{\nu}} \psi_N^*(\mathbf{r}) \psi_{N'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ = & -\frac{1}{v^2} \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{g}'} T_i^*(\mathbf{g}) \phi_N^*(\mathbf{g}) [(\mathbf{k}+\mathbf{g})(\mathbf{k}+\mathbf{g}) + V_0] \\ & \times \phi_{N'}(\mathbf{g}') T_j(\mathbf{g}') \sum_{\nu} 4\pi R_{\nu}^2 \frac{j_1(|\mathbf{g}-\mathbf{g}'|R_{\nu})}{|\mathbf{g}-\mathbf{g}'|} e^{i(\mathbf{g}'-\mathbf{g})\mathbf{r}_{\nu}} \\ & + \sum_{\nu} \sum_{\Lambda} [\beta_{N, \nu\Lambda}^* \beta_{N', \nu\Lambda} g_{\nu\lambda} g'_{\nu\lambda} + \beta_{N, \nu\Lambda}^* \alpha_{N', \nu\Lambda} g_{\nu\lambda} \dot{g}'_{\nu\lambda} \\ & + \alpha_{N, \nu\Lambda}^* \beta_{N', \nu\Lambda} \dot{g}_{\nu\lambda} g'_{\nu\lambda} + \alpha_{N, \nu\Lambda}^* \alpha_{N', \nu\Lambda} \dot{g}'_{\nu\lambda}] R_{\nu}^2. \quad (24) \end{aligned}$$

Объединяя все три интеграла, получаем окончательное выражение для матричных элементов оператора Гамильтона

$$\begin{aligned}
H_{NN'}^{MT} = & \sum_{\nu} \sum_{\Lambda} \epsilon(\beta_{N,\nu\Lambda}^* \beta_{N',\nu\Lambda} + \alpha_{N,\nu\Lambda}^* \alpha_{N',\nu\Lambda} \langle \dot{g}_{\nu\lambda} | \dot{g}_{\nu\lambda} \rangle) \\
& + \sum_{\nu} \sum_{\Lambda} R_{\nu}^2 [g'_{\nu\lambda} \dot{g}_{\nu\lambda} (\beta_{N,\nu\Lambda}^* \alpha_{N',\nu\Lambda} + \alpha_{N,\nu\Lambda}^* \beta_{N',\nu\Lambda}) \\
& + \beta_{N,\nu\Lambda}^* \beta_{N',\nu\Lambda} g_{\nu\lambda} g'_{\nu\lambda} + \alpha_{N,\nu\Lambda}^* \alpha_{N',\nu\Lambda} \dot{g}_{\nu\lambda} \dot{g}'_{\nu\lambda}] \\
& + \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{g}} T_i^*(\mathbf{g}) \phi_N^*(\mathbf{k} + \mathbf{g}) (|\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2 + V_0) \phi_{N'}(\mathbf{k} + \mathbf{g}) T_j(\mathbf{g}) \\
& - \frac{1}{v^2} \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{g}'} T_i^*(\mathbf{g}) \phi_N^*(\mathbf{g}) [(\mathbf{k} + \mathbf{g})(\mathbf{k} + \mathbf{g}') + V_0] \\
& \times \phi_{N'}(\mathbf{g}') T_j(\mathbf{g}') \sum_{\nu} 4\pi R_{\nu}^2 \frac{j_1(|\mathbf{g} - \mathbf{g}'| R_{\nu})}{|\mathbf{g} - \mathbf{g}'|} e^{i(\mathbf{g}' - \mathbf{g})\mathbf{r}_{\nu}}. \quad (25)
\end{aligned}$$

Матричные элементы матрицы перекрытия получают аналогично и имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
S_{NN'}^{MT} = & \sum_{\nu} \sum_{\Lambda} \epsilon(\beta_{N,\nu\Lambda}^* \beta_{N',\nu\Lambda} + \alpha_{N,\nu\Lambda}^* \alpha_{N',\nu\Lambda} \langle \dot{g}_{\nu\lambda} | \dot{g}_{\nu\lambda} \rangle) \\
& + \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{g}} T_i^*(\mathbf{g}) \phi_N^*(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \phi_{N'}(\mathbf{k} + \mathbf{g}) T_j(\mathbf{g}) \\
& - \frac{1}{v^2} \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{g}'} T_i^*(\mathbf{g}) \phi_N^*(\mathbf{g}) \phi_{N'}(\mathbf{g}') T_j(\mathbf{g}') \\
& \times \sum_{\nu} 4\pi R_{\nu}^2 \frac{j_1(|\mathbf{g} - \mathbf{g}'| R_{\nu})}{|\mathbf{g} - \mathbf{g}'|} e^{i(\mathbf{g}' - \mathbf{g})\mathbf{r}_{\nu}}. \quad (26)
\end{aligned}$$

Список литературы

- [1] G.G. Koelling. Repts. Progr. Phys. **44**, 2, 139 (1981).
- [2] O.K. Andersen. Phys. Rev. **B12**, 8, 864 (1975).
- [3] D.D. Koelling, G.O. Arbman. J. Phys. **F5**, 11, 2041 (1975).
- [4] J.W. Davenport. Phys. Rev. **B26**, 6, 2896 (1984).
- [5] J.W. Davenport, M. Weinert, R.E. Watson. Phys. Rev. **B32**, 8, 4876 (1985).
- [6] J.W. Davenport, R.E. Watson, M. Weinert. Phys. Rev. **B32**, 8, 4883 (1985).
- [7] G.W. Fernando, J.W. Davenport, R.E. Watson, M. Weinert. Phys. Rev. **B40**, 5, 2757 (1989).
- [8] M. Khun, R. Sammynaiken, T.K. Sham. Physica **B252**, 11, 114 (1998).
- [9] Г.В. Самсонов, И.М. Виноцкий. Тугоплавкие соединения. М. (1976). 577 с.
- [10] E. Kusano, M. Kitagawa, Y. Kuroda, H. Nanto, A. Kinbara. Thin Solid Films **334**, 151 (1998).
- [11] C. Kral, W. Lengauer, D. Rafaja, P. Etmayer. J. of A&C. **265**, 1-2, 215 (1998).