

4. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред.— Ч. 2.— М.: Наука, 1987.
5. Гельфанд Б. Е., Медведев С. П., Фролов С. М. // Докл. АН СССР.— 1988.— 301, № 6.— С. 1413.
6. Гельфанд Б. Е., Медведев С. П., Поленов А. Н. и др. // ТВТ.— 1989.— 27, № 6.— С. 1159.
7. Холодильная техника.— Кн. 1.— Л.: Госторгиздат, 1960.
8. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей.— М.: Наука, 1972.
9. Nayfeh A. H., Hassan S. D. // J. Mecanique.— 1969.— 8, N 2.— P. 193.

г. Москва

Поступила в редакцию 3/IV 1990

УДК 535.338.4

В. С. Демиденко, Л. Ф. Скоренцев, Е. Ю. Мурышев,
Г. И. Сыренков

РАСЧЕТ $p-v$ -ИЗОТЕРМ ЖЕЛЕЗА С НИКЕЛЕМ И ХРОМОМ И ПАРЦИАЛЬНЫХ ВКЛАДОВ В НИХ ЭЛЕКТРОННЫХ s -, d -ПОДСИСТЕМ

На основе обобщенных на случай магнетизма уравнений Петтифора проведено теоретическое исследование $p-v$ -изотерм железа, никеля, хрома и сплавов $\text{Fe}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}$ и $\text{Fe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}$. Такой подход позволил проанализировать аномалии изотерм, связанные с фазовыми переходами ОЦК—ПУ посредством выделения парциальных вкладов s и d электронных подсистем, предложить концепцию «коллапсированных структур». Используемый метод применим для ряда других металлов и их сплавов.

Сплавы на основе железа представляют большой класс материалов, эффективно используемых в технике. В ряде случаев эти сплавы подвергаются интенсивным нагрузкам и претерпевают превращения, существенно влияющие на весь комплекс физико-механических свойств. Систематизация этих эффектов на основе экспериментов с целью прогноза новых явлений, составов с оптимальными характеристиками сложна, трудоемка и не имеет достаточной общности. В этой ситуации особую роль играет разработка методов теоретического описания поведения сплавов и, в частности, в условиях всестороннего давления.

В данной работе исследуются возможности электронной теории твердого тела в применении к системам, сложность которых связана с наличием электронных s - и d -подсистем, обуславливающих магнетизм, превращения типа решетка—решетка. Поскольку конечный результат определяется разностью весьма больших величин, то необходимо использовать методы, обеспечивающие достаточно адекватное представление физики формирования твердого тела из свободных атомов. В принципе современное состояние электронной теории при использовании самосогласованных методов расчета дает фундаментальную основу для решения поставленной задачи. Однако ряд проблем собственно теории, трудоемкость этих методов, особенно в случае сплавов, делает нереальным их использование в прогнозе закономерностей, прикладных задачах.

Наряду с этим в последние годы созданы и широко апробированы методы, успешно моделирующие электронную структуру магнитных сплавов переходных элементов, межатомное взаимодействие в них [1—4]. Наряду с этим развиты теории, обеспечивающие расчет уравнений состояния немагнитных переходных металлов [5, 6] и сплавов [7].

Особенность предлагаемого подхода—комплексное использование концепции ренормализованного атома [8] и приближения когерентного потенциала [1—3, 9] для случая магнитных сплавов переходных элементов с учетом энергетической конкуренции их кристаллических структур. Последнее обстоятельство, как известно [10], эффективно используется в технических приложениях, но не имеет достаточной теоретической основы. Известные попытки объяснения структурных переходов под

давлением базируются на качественном анализе равновесных диаграмм состояния, природа которых сама по себе требует специальных исследований.

Модель электронной структуры и основные выражения для расчета

В теории электронной структуры d -металлов и их сплавов принято считать, что s - и d -подсистемы ведут себя достаточно автономно, поэтому их вклады в свойства могут проявляться по-разному, однако разделить их с формальной точки зрения непросто.

Суть дела заключается в том, что как s -, так и d -электроны испытывают воздействие одного и того же созданного взаимодействием электронов, зависящего от объема обменно-корреляционного потенциала. Обойти эту трудность удалось в [6], что и определило использование этой модели в работе. Можно показать, что соответствующие выражения [6, 11] для магнитных сплавов переходных элементов принимают общий для всех структур вид: для d -подсистемы

$$3p_d v = \sum_i c_i N_d^i (c_d^i + I_i \mu_{d, \text{пар}}^i / N_d^i - \varepsilon_{xc}^i) / m_d + \sum_i c_i (2/m_d - 2(c_d^i + I_i \mu_{d, \text{пар}}^i / N_d^i - \varepsilon_{xc}^i) R^2 a_d^i) U_d + 5U_d - \frac{3}{4} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\mu^2}{\rho(\varepsilon_F)} \right), \quad (1)$$

для s -подсистемы

$$3p_s v = 3N_s (B_s^* + I_s \mu_s / N_s - \varepsilon_{xc}^*) / m_s + 2 [1 - 3(1 - m_s) / 2m_s - (B_s^* + I_s \mu_s - \varepsilon_{xc}^*) R^2 a_s] U_s \quad (2)$$

и вклада sd -гибридизации

$$3p_{sd} v = \frac{5}{2} \{ [2(c_d^* + I_d \mu_d - \varepsilon_{xc}^*) / m_d - 3(B_s^* + I_s \mu_s - \varepsilon_{xc}^*) / m_s] / (c_d^* - B_s^*) \} U_{sd}. \quad (3)$$

Структурная зависимость параметров теории определяет такую зависимость и для полного уравнения состояния

$$3pv = 3p_d v + 3p_s v + 3p_{sd} v.$$

Здесь и далее p_d , p_s , p_{sd} — парциальные вклады в давление p электронных подсистем и sd -гибридизации; v — объем, приходящийся на 1 атом; μ — магнитные моменты; $\mu_{\text{пар}}$ — парциальный магнитный момент; ε_{xc}^i — обменно-корреляционный вклад в энергию i -го компонента; U — кинетическая энергия; I — обменный параметр Стонера. Звездочкой отмечены характеристики сплава, взвешенно-средние от соответствующих характеристик компонентов. Индекс i у символа означает отношение к компоненту последнего.

В отличие от [6, 11] в работе принята иная система параметров, основанная на физически ясной концепции перестройки атомных энергетических уровней и ренормализации электронной плотности при переходе от свободного атома к кристаллу. Кроме того, распространение модели на случай магнитного состояния обусловило необходимость использования более общего выражения для расчета обменно-корреляционного вклада. Принято, что N_d^i и N_s^i — число d - и s -электронов на атом в конфигурации, полученной из самосогласованных расчетов [10], а c_i — концентрация i -го компонента. Энергия кристаллического атомного уровня, отсчитанного от s -уровня ренормализованного атома [8], с учетом [12, 13] имеет вид

$$c_d^i = c_{\text{ат}}^i + \alpha_i / R^5, \quad (4)$$

где $c_{\text{ат}}^i$ — энергия атомного уровня свободного атома, отсчитанная от атомного s -уровня свободного атома. В сущности (4) отражает фундаментальный факт перестройки атомных уровней и ренормализационного

эффекта, возникающего при переходе атома из свободного состояния в кристаллическое. Коэффициент α_i находим из условия равенства правой части (4) величине $c_d^i(R_0^i)$, где R_0^i — равновесный радиус сферы Вигнера — Зейца.

Для расчета обменно-корреляционного вклада использовано приближение [14], которое для однородного распределения электронной плотности запишется так:

$$\epsilon_{xc}^i = \frac{2}{\pi} \left(\frac{3\pi^2 (N_d^i + N_s^i)}{v_{ВЗ}} \right)^{1/3} \left(1 + 0,7734x \cdot \ln \left(1 + \frac{1}{x} \right) \right),$$

где $x = \frac{1}{21} \left(\frac{v_{ВЗ}}{4\pi (N_d^i + N_s^i)} \right)^{1/3}$; $v_{ВЗ}$ — объем ячейки Вигнера — Зейца. Эффективная масса d -электрона в d -зоне шириной w находится из выражения [6] $m_d = 25/wR^2$. Причем, согласно [10], радиальная зависимость ширины d -зоны связана с ее равновесным значением следующим образом:

$$w = w_0 \left(\frac{R_0^*}{R} \right)^5.$$

Тогда для эффективной массы s -электронов имеем [15]

$$m_s = (1 + 2,91/m_d)^{-1}.$$

Используя результаты [11], можно записать

$$a_s = \frac{1}{5} \frac{m_s R^2}{3 + m_s R^2}, \quad a_d = \frac{1}{5} \frac{m_d R^2}{2 + m_d R^2}.$$

В [12] предложено выражение

$$B_s = N_s (\beta/R^3 - 3/R) - 4/3 \cdot \gamma + 2,4 \cdot N_s/R,$$

где $\beta = 3r_A^2$; r_A — радиус пустого остова Ашкрофта, определенный из положения дна s -зоны для Вигнера — Зейца ($r_{ВЗ}$), а хартриевский обменный потенциал

$$\gamma = \frac{2}{\pi} \left(\frac{3\pi^2 (N_d + N_s)}{v} \right)^{1/3}.$$

Величины U_d , U_s и U_{sd} являются кинетическими энергиями d -, s -зон и энергией гибридизации [11]:

$$U_d = \left(\frac{R_0^*}{R} \right) \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \rho(\epsilon) |_{R_0^*} \cdot \epsilon d\epsilon, \quad (5)$$

$$U_s = \frac{2,21}{R^2} N_s, \quad (6)$$

$$U_{sd} = \frac{1}{5} (c_d^* - B_s^*) \Delta N, \quad (7)$$

где $\rho(\epsilon)$ — плотность d -состояний рассматриваемой системы $\Delta N = 0,02N_d(10 - N_d) + 0,40$.

Для определения точки фазового перехода на $p-v$ -кривых необходимо сравнить одноэлектронные энергии фаз, включающие кроме (5) составляющую магнитной энергии в явном виде. Магнитный вклад в энергию при наличии момента $\mu = \sum_i c_i |\mu_{d,пар}^i|$, как легко показать, представляет собой сумму повышающей полную энергию кинетической составляющей и конкурирующей с ней потенциальной:

$$U_\mu = \frac{1}{4} \frac{\mu^2}{\rho(\epsilon_F)} - \frac{1}{4} I \mu^2, \quad (8)$$

где $I = \frac{1}{2} \epsilon_{xc}/N_d^*$ — обменный параметр Стонера. Это дает значения, близкие к оцененным в [12]. Для радиальной зависимости магнитного

момента использовано аппроксимирующее результаты самосогласованных расчетов [10] выражение

$$\mu_{d, \text{пар}}^i = \mu_{d, \text{пар}}^i |_{v_{\text{кр}}} \cdot \arctg \left[\left(\frac{v}{v_{\text{кр}}} \right)^2 - 1 \right],$$

$v_{\text{кр}}^i$ — параметр, оцененный по данным [10] при $\mu_{d, \text{пар}}^i |_{v_{\text{кр}}} = 0$.

Из изложенного видно, что лишь атомные характеристики, положение дна s -зоны и магнитный момент могут быть найдены из соответствующих данных для чистых металлов. Особую роль в теории играют величины $\rho(\epsilon) |_{R_0}$, w_0 и $U_d |_{R_0}$, отражающие эффекты сплавления и существенно зависящие от них. Расчет $\rho(\epsilon) |_{R_0}$ проведен с использованием представлений так называемого локального метода теории сплавов [9], который обобщает приближения когерентного потенциала в рамках узкозонной модели. Согласно [9], электронная структура полностью разупорядоченного сплава замещения узкозонных металлов может быть описана уравнением самосогласования

$$\sum_i c_i \left[\frac{\epsilon_i + La_i^j - z}{a_i^j - (\epsilon_i + La_i^j - z)F} \right] = 0, \quad (9)$$

где функция Грина F эффективной среды связана с невозмущенной плотностью состояний $\rho_0(\epsilon)$ сплава в структуре j интегральным соотношением

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{L - \epsilon}; \quad (10)$$

ϵ_i — средние энергии d -состояний в сплавах; z — энергетическая переменная, a_i^j — соотношение ширины d -зон чистых компонентов в рассматриваемых структурах:

$$a_1^j = 1, \quad a_2^j = w_2^j/w_1^j;$$

w_1^j, w_2^j — ширина d -зон в чистых металлах структуры j . В качестве $\rho_0(\epsilon)$ использованы канонические зоны Андерсена [13], а полный, включающий виртуальные структуры набор ширин d -зон $\{w_i^j\}_{j=1}$ достраивался для каждого металла i по известной из высокоточных зонных расчетов ширине w_i^j в структуре j [16] с помощью канонических соотношений из [13]. В качестве значений ϵ_i были использованы значения ренормализованных атомных d -уровней [8].

Решение уравнения (9) совместно с (10) позволило определить значения когерентного локатора L и функции Грина F и тем самым — значения локальных плотностей состояний на атомах

$$\rho_i(z) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{a_i^j} \left(\frac{z - \epsilon_i}{a_i^j} - L + \frac{1}{F} \right)^{-1} \right]$$

и полную плотность состояний сплава

$$\rho(z) = \sum_i c_i \rho_i(z). \quad (11)$$

Из (15) видно, что по известному заполнению N_d , радиусу и плотности состояний (11) функция U_d/R определяется полностью.

Результаты и обсуждение

Исходные параметры, необходимые для расчета зависимости $p(v)$, представлены в таблице. Энергетические параметры выражены в ридбергах, радиус сферы Вигнера — Зейца — в атомных единицах [5], магнитные моменты — в магнетонах Бора.

Элемент	N_d^i	N_s^i	R_0^i	$\frac{w_{\text{ПУ}}}{w_{\text{ОЦК}}}$	$c_{\text{ат}}^i$	c_d^i	ε_i	$r_{\text{ВЗ}}$	$\frac{\mu_d}{\mu_d^{\text{ОЦК}}}$	$\frac{\mu_d}{\mu_d^{\text{ПУ}}}$	R_0^i (теория)	B_0^i эксперимент	B_0^i теория
Fe	6,6	1,4	2,67	$\frac{0,41}{0,44}$	-0,350	0,176	-0,165	-0,69	$\frac{0,60}{2,20}$	—	2,67	168	199
Ni	8,6	1,4	2,60	$\frac{0,34}{0,35}$	-0,460	0,060	-0,314	-0,79	$\frac{0,6}{0,6}$	$\frac{3,00}{1,00}$	2,54	186	211
Cr	4,6	1,4	2,70	$\frac{0,56}{0,61}$	-0,230	0,390	-0,007	-0,56	$\frac{0,0}{-0,4}$	$\frac{2,15}{-0,20}$	2,80	190	177

На рис. 1, 2 приведены результаты расчетов изотерм. Теория предсказывает известный факт структурного перехода в Fe для $p \approx 12$ ГПа и отсутствие таких переходов у Ni и Cr. При этом сам структурный переход железа из ОЦК- в ГПУ-решетку возникает из-за более низкой зонной энергии $3d$ -электронов плотноупакованной фазы при $R \leq 2,62$ а. е. В адиабатических условиях отмеченный горизонтальным отрезком переход от $p-v$ -изотермы ОЦК-решетки к $p-v$ -изотерме ГПУ-структуры железа, как показывает эксперимент, размывается, но этот эффект пока не может быть учтен в теории достаточно корректно. Природу структурного фазового перехода в железе и его отсутствие у никеля и хрома удобно рассмотреть посредством анализа результатов рис. 2, а, б. Видно, что полное давление, возникающее в системе при изменении объема, состоит из четырех вкладов. Положительного, связанного с изменением магнитного момента p_μ ; отрицательного для больших межатомных расстояний и положительного при равновесном объеме давления подсистемы p_s ; отрицательного даже при равновесном объеме давления d -подсистемы

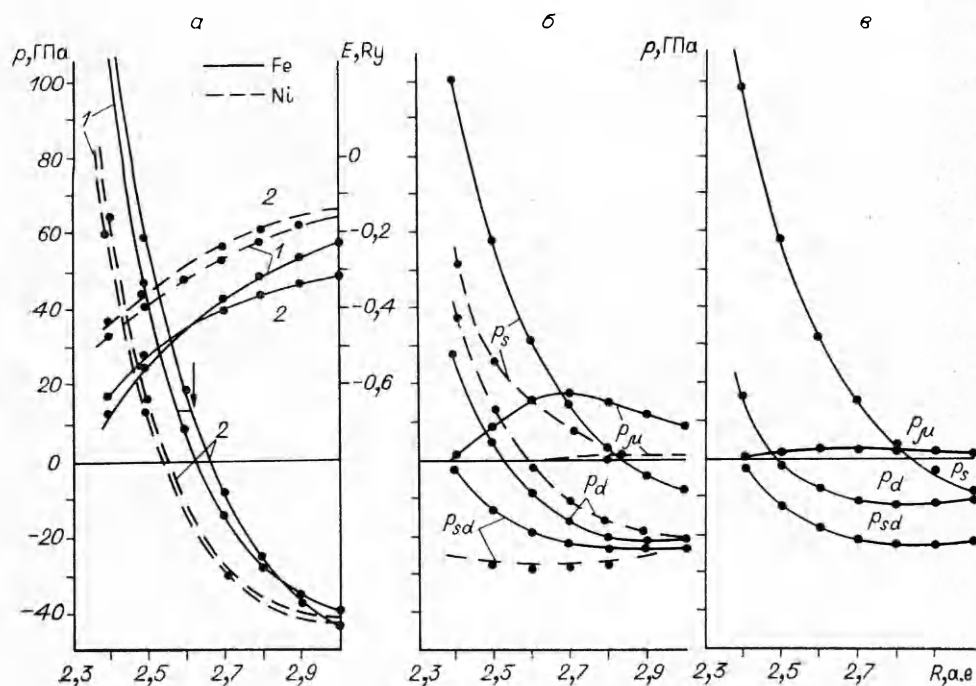


Рис. 1. $p-v$ -изотермы железа и никеля.

а — полные изотермы и зонные энергии $3d$ -электронов для ГПУ (1) и ОЦК (2) структур; б, в — парциальные изотермы для структур ОЦК (б) и ГПУ (в).

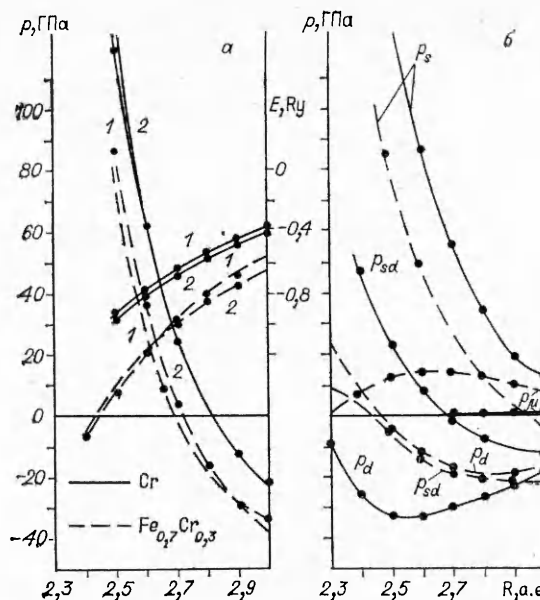


Рис. 2. $p-v$ -изотермы хрома и сплава $\text{Fe}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}$ (обозначения аналогичны рис. 1).

и, наконец, давления от эффекта sd -гибридизации. Эти вклады имеют простое и наглядное объяснение.

При отсутствии d -подсистемы кривая $p-v$ формируется в результате конкуренции между радиальной зависимостью дна s -зоны, описываемой соотношением Бардина — Фрелиха (первый член правой части (2)) и положительным вкладом кинетической энергии электронов, нарастающей, как видно из (6), с уменьшением объема для движения.

С другой стороны, радиальная зависимость U_d такова (5), что эта энергия понижается с уменьшением объема из-за все большего перекрытия d -волновых функций. Поскольку на процесс понижения зонной энергии накладывается возрастание энергетического центра тяжести d -зоны (4), то в целом мы имеем кривую p_d-v с минимумом. В давлении из-за sd -гибридизации, как видно из (3), (7) проявляются разные стороны обеих подсистем. Давление p_u в железе немонотонно, но в конечном итоге структурный переход обеспечивается магнитным вкладом (8) в полную энергию фаз. Такое пояснение хорошо иллюстрирует рис. 1, б, в, из которого видно, что изменение зонной структуры d -состояний ОЦК-решетки при переходе к ГПУ вызывает синхронное изменение вкладов p_u , p_d и p_{sd} , тогда как вклад в $p-v$ -изотерму от s -подсистемы практически не изменился.

Изложенное позволяет понять отличие $p-v$ -изотерм Ni и Cr от $p-v$ -изотерм Fe. Так, в никеле относительно снижен вклад p_s и увеличен p_{sd} , тогда как в хrome положительный вклад p_s существенно возрастает, отрицательный p_{sd} ослабляется, но в условиях существенно возросшего отрицательного вклада p_d особенно драматических эффектов не наблюдается. Отличие равновесных объемов всех рассмотренных металлов от экспериментальных укладывается в интервал $\pm 10\%$, а ошибка в определении равновесного радиуса сферы Вигнера — Зейца и того меньше. Рассчитанный из $p-v$ -кривых для d -металлов по соотношению

$$B_0 = v \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_{v_0}$$

объемный модуль упругости, как видно из таблицы, отличается от экспериментального менее чем на 20 %. Небольшая подгонка исходных параметров позволяет достигнуть более высокой точности, однако в этом нет смысла, когда рассматривается прежде всего физическая сторона проблемы.

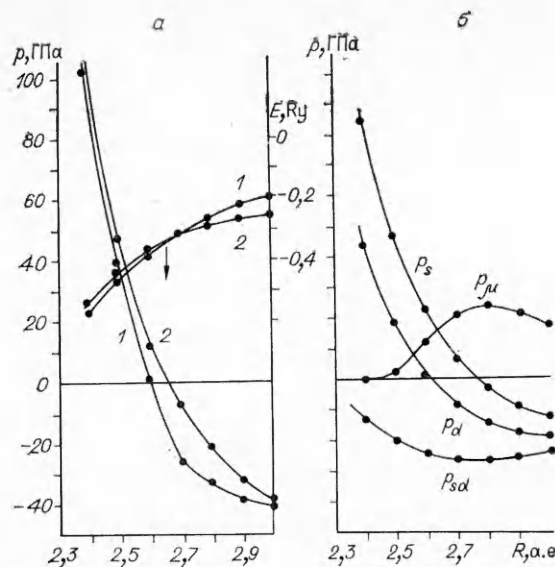


Рис. 3. $p - v$ -изотермы сплава $\text{Fe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}$ (обозначения аналогичны рис. 1).

Приведенные оценки показывают, что развиваемый подход в целом достаточно надежно отражает сложные, складывающиеся из большого числа составляющих физические свойства металлических систем. На рис. 2, а, б и 3, а, б представлены результаты для сплавов $\text{Fe}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}$, $\text{Fe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}$. Видно, что легирование железа хромом приводит к возрастанию давления фазового перехода, что хорошо согласуется с экспериментом [16]. Это обусловлено тем, что возрастает положительный вклад и уменьшается составляющая, связанная с эффектом гибридизации, компенсируя меньшие, чем в железе, значения p_m . Радиальная зависимость p_d в сплаве с хромом менее крутая, чем в железе. С другой стороны, в сплавах железа с никелем теория описывает эффект падения давления фазового перехода, обнаруженный в опыте [16]. Однако величина падения заметно превышает экспериментальную. Тем не менее анализ рис. 3, б представляется необходимым, прежде всего потому, что сильная концентрационная зависимость давления фазового перехода сплавов $\text{Fe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}$ наблюдается, как показывает расчет, в узком интервале 20 ÷ 30 ат.%. Это означает, что в условиях, способствующих атомному расслоению (неизотермичность, давление со сдвигом), возможно образование набора кристаллографически идентичных фаз с разным параметром решетки, что несомненно скажется на механических свойствах материалов, их отклик на последующее термическое воздействие.

Интересно и соотношение вкладов в общее давление. Хорошо видно, как в железоникелевом сплаве заметно снижается положительный вклад p_s , нарастает радиальная зависимость p_d , а магнитная составляющая даже больше, чем у железа. Последнее обстоятельство согласуется с попытками объяснения инварных свойств железоникелевых сплавов, конкуренцией ангармонизма тепловых колебаний, расширяющих решетку, и эффекта падения магнитного вклада в объем с ростом температуры.

В заключение обратим внимание на важное для практического применения изложенных результатов обстоятельство. Результаты теории относятся к идеальной кристаллической структуре, для которой в конечном итоге $p - v$ -зависимости определяются конкуренцией между d -подсистемой, стремящейся уменьшить объем, приходящийся на атом, и разрыхляющей решетку s -подсистемой. В реальных условиях интенсивного деформирования в окрестности концентраторов напряжений возникают дефектные образования, способные воспринять часть избыточной плотности, а значит и давления почти свободных s -электронов. Как следствие, вне областей деформации возникнет эффект коллапсирования атомов за

счет отрицательного давления d -электронов. В пределе это коллапсирование способно распространиться вплоть до объемов, когда во взаимодействие вступают внутренние состояния ядер. Поэтому в локальных, сильно деформированных областях интенсивно нагруженных металлов и сплавов могут возникнуть атомные структуры, существенно отличающиеся от окружающего материала.

Выводы

1. Разработана модель, основанная на представлениях электронной теории твердого тела и позволяющая описывать и прогнозировать наиболее характерные черты p — v -изотерм переходных металлов и сплавов на их основе.

2. Проанализированы парциальные вклады s -, $3d$ -электронов в объемные свойства металлов и сплавов. Дано качественное, а в ряде случаев количественное предсказание зависимости давления структурного фазового превращения от состава.

3. Предложена концепция коллапсированных атомных структур как результата релаксации отрицательного давления d -электронов в условиях дефектной среды.

ЛИТЕРАТУРА

1. Эрнрейх Г., Шварц Л. Электронная структура сплавов.— М.: Мир, 1979.
2. Демиденко В. С., Кальянов А. П. Метод когерентного потенциала в металловедении.— Томск: Изд-во Томского ун-та, 1984.
3. Демиденко В. С., Кальянов А. П. Электронная структура и свойства разупорядоченных сплавов d -периодов // Изв. вузов. Физика.— 1983.— № 3.— С. 62—76.
4. Скоренцев Л. Ф., Демиденко В. С. Энергия связи в узкозонных сплавах // УФЖ.— 1984.— № 27.— С. 1081—1083.
5. Walzer U. Calculation of the Hugoniot pressure and pressure derivative of the bulk moduls for transition metals // High temperature — high pressures.— 1987.— N 19.— P. 161—176.
6. Pettifor D. G. s - and d -contributions to the transition metal equation of state // Phys. Conf. Ser.— 1978.— N 39.— P. 6—12.
7. Kakehashi V. The pressure — volume relation and cohesive properties in transition metal alloys // J. Phys. of Japan.— 1980.— 49, N 1.— P. 28—40.
8. Hodges L., Watson R. E. Renormalized atoms and the band theory of transition metals // Phys. Rev. B.— 1972.— 5, N 10.— P. 3953—3971.
9. Shiba H. A reformulation of the coherent potential approximation and its applications // Prog. of Theor. Phys.— 1971.— 46, N 1.— P. 77—94.
10. Moryzzi V. L., Markus P. M. Magnetizm in the $3d$ -transition metals: Onset approach to the Hund's rule limit // Phys. Rev. B. 1988.— 38, N 3.— P. 1613—1621.
11. Pettifor D. G. The theory of energy bands and related properties of $4d$ -transition metal: I. Band parameters and their volume dependence // J. Phys. F., Met. Phys.— 1977.— 7, N 4.— P. 613—633; III. s - and d -contributions to the equations of states // J. Phys. F., Met. Phys.— 1978.— 8.— P. 219—230.
12. Петтифор Д. Г. Электронная теория металлов. Физическое металловедение/Под ред. Р. У. Кана, П. Хаазена.— М.: Металлургия, 1987.— С. 370—447.
13. Andersen O. K., Madsen J., Poulsen U. K. et al. Magnetic ground state properties of transition metals // Physica.— 1977, 86—88 B.
14. Faulkner J. S. The modern theory of alloys // Prog. in material sci.— 1972.— 27.— P. 1—187.
15. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел.— М.: Мир.— Т. 2.
16. Watson R. E., Bennett L. H. Transition metals: d -band hebridization, electronegativities and structural stability of intermetallic compounds // Phys. Rev.— 1978.— 18, N 12.— P. 6439—6449.

г. Томск

Поступила в редакцию 23/III 1990