

## ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

УДК 548.33; 536.42

К 70-летию Института кристаллографии РАН

### ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ ДЛЯ КРИСТАЛЛА $[N(CD_3)_4]_2ZnCl_4$

© 2013 г. Д. Г. Санников

Институт кристаллографии РАН, Москва  
E-mail: sannikov@ns.crys.ras.ru

Поступила в редакцию 25.12.2012 г.

Построена теоретическая фазовая диаграмма кристалла  $[N(CD_3)_4]_2ZnCl_4$  на плоскости двух коэффициентов термодинамического потенциала. На диаграмме выбрана ориентация осей температуры  $T$  и давления  $P$ . На основе первой диаграммы строится вторая теоретическая фазовая  $T$ – $P$ -диаграмма, продолженная в область слабых отрицательных давлений для недеятерированного кристалла  $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_4$ . Предполагается, что эту область можно будет наблюдать для дейтерированного кристалла  $[N(CD_3)_4]_2ZnCl_4$ .

DOI: 10.7868/S0023476113060209

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ДЛЯ КРИСТАЛЛА $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_4$

На рис. 1 представлена экспериментальная фазовая диаграмма  $T$ – $P$  (температура–давление) для кристалла  $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_4$  [1]. Этот кристалл принадлежит к многочисленному и хорошо изученному семейству соединений  $TMA_2XY_4$ , где  $TMA$  – тетраметиламмоний  $[N(CH_3)_4]$ ,  $X$  – двухвалентный металл ( $Mn$ ,  $Fe$ ,  $Co$ ,  $Ni$ ,  $Cu$ ,  $Zn$ ),  $Y$  – галоген ( $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ),  $H$  может быть заменено на  $D$  [2, 3].

На  $T$ – $P$ -диаграмме рис. 1 наблюдаются следующие фазы. Исходная фаза  $C$  симметрии  $D_{2h}^{16}$  или  $Pmc$  в обычной для ТМА-кристаллов установке  $bca$ . Несоразмерная  $IC$ -фаза с модулирующим вектором  $q_z = q_c^*$ . Соразмерная фаза  $C_0$  с  $q = 0$ , т.е. имеющая ту же элементарную ячейку, что и  $C$ -фаза симметрии  $C_{2h}^5 = P12_1/c1$ . Соразмерная фаза  $C_5$  с  $q = 2/5$  симметрии  $C_{2v}^9 = P2_1cn$ . Две соразмерные фазы  $C_3$  с  $q = 1/3$ :  $C'_3$  симметрии  $C_{2h}^5 (P112_1/n)$  и  $C''_3$  симметрии  $D_2^4 (P2_12_12_1)$ . Все перечисленные группы симметрии соразмерных фаз являются подгруппами группы симметрии исходной  $C$ -фазы по ее двумерному представлению  $B_{2g}$ .

Особенностью фазовой диаграммы рис. 1 является то, что на ней существуют две  $C_3$ -фазы,  $C'_3$  и  $C''_3$ , разделенные  $C_0$ -фазой, с разными группами симметрии, не являющимися подгруппами друг друга.

Естественно предположить, что если продвинуться в область отрицательных давлений на рис. 1, то линии, разделяющие фазы  $C'_3$ ,  $C''_3$  и  $C_0$ , должны сойтись и продолжиться линией фазовых переходов (ФП) первого рода между фазами  $C'_3$  и

$C''_3$ . Эту область отрицательных давлений можно будет наблюдать в дейтерированном  $d$ -кристалле  $TMA_2ZnCl_4$ , поскольку значение  $P = 0$  в  $d$ -кристалле сдвинуто по отношению к  $h$ -кристаллу в сторону больших значений  $q$  [2].

Цель настоящей работы – построение  $T$ – $P$ -диаграммы с областью отрицательных давлений. При этом будет использоваться методика построения теоретических фазовых диаграмм, разработанная в [4].

#### МЯГКАЯ ОПТИЧЕСКАЯ ВЕТВЬ СПЕКТРА НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛА

Мягкая оптическая ветвь спектра нормальных колебаний кристалла для всех ТМА-кристаллов представлена в виде

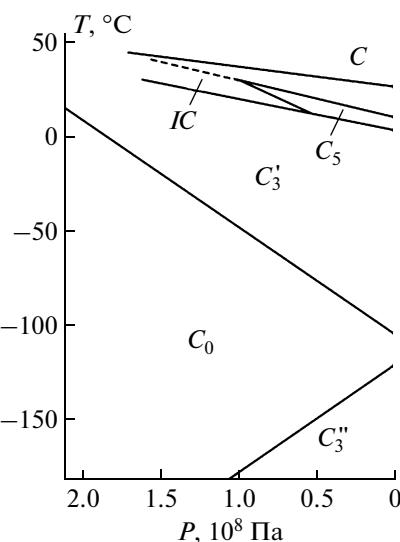


Рис. 1. Экспериментальная фазовая  $T$ – $P$ -диаграмма для кристалла  $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_4$  [1].

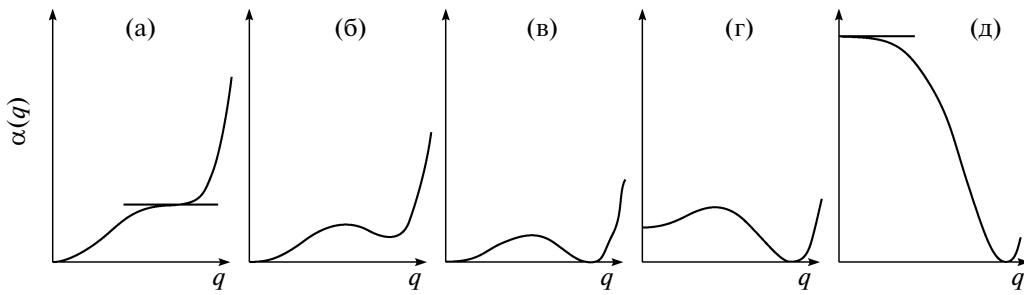


Рис. 2. Зависимость коэффициента упругости  $\alpha(q)$  мягкой оптической ветви от безразмерного волнового числа  $q$  при различных значениях коэффициента  $\delta$ :  $\delta = -\kappa^2/3\tau$  (а),  $-\kappa^2/3\tau < \delta < -\kappa^2/4\tau$  (б),  $\delta = -\kappa^2/4\tau$  (в),  $-\kappa^2/4\tau < \delta < 0$  (г),  $\delta = 0$  (д).

$$\alpha(q) = \alpha - \delta q^2 - \kappa q^4 + \tau q^6, \quad \kappa > 0, \quad \tau > 0. \quad (1)$$

Эта ветвь имеет два минимума в определенном диапазоне значений коэффициента  $\delta$  ( $-\kappa^2/3\tau < \delta < 0$ ). Один – в произвольной точке зоны Бриллюэна, определяющий ФП из исходной  $C$  в несоподразмерную  $IC$ -фазу. Другой – в точке  $q = 0$ , определяющий ФП из исходной  $C$  в соподразмерную  $C_0$ -фазу.

На рис. 2 представлена зависимость  $\alpha(q)$  (1) при различных значениях коэффициента  $\delta$ . При значении  $\delta = -\kappa^2/3\tau$  исчезает минимум в произвольной точке зоны Бриллюэна (на рис. 2а горизонтальной линией отмечена точка перегиба при  $q = b$ ). В интервале значений  $-\kappa^2/3\tau < \delta < -\kappa^2/4\tau$  осуществляется переход из  $C$  в  $C_0$ -фазу. При значениях  $-\kappa^2/4\tau < \delta \leq 0$ , а также при значениях  $0 < \delta$  вплоть до значения  $\delta$ , отвечающего  $q = q_{Br}$ , осуществляется переход из  $C$  в  $IC$ -фазу. При значении  $\delta = -\kappa^2/4\tau$  оба минимума одновременно обращаются в ноль. На фазовой диаграмме возникает тройная точка, в которой сходятся три линии фазовых переходов  $C-IC$ ,  $C-C_0$ ,  $C_0-IC$ . Назовем ее *LT-точкой* (*Lifshitz-type*). По своим свойствам она отличается от *L-точки* (*Lifshitz*). Все зависимости на рис. 2 отвечают значению  $\alpha$ , при котором происходит ФП.

Зависимость (1) целесообразно переписать в виде

$$\begin{aligned} \alpha(q) &= a + \Delta(q), \\ \Delta(q) &= t(b^2 - q^2)^2[2(b^2 - q_L^2) + q^2], \quad \alpha(b) = a. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь введены координаты  $a$  и  $b$  мягкой моды в произвольной точке зоны Бриллюэна. Удобно также ввести обозначения  $\Delta_{m/l}$ ,  $\Delta_0$ ,  $q_L^2$ , а также выразить коэффициент  $\delta$  через  $b^2$  и  $q_L^2$ :

$$\begin{aligned} \alpha(q_{m/l}) &= a + \Delta_{m/l}, \quad \Delta_{m/l} \equiv \Delta(q_{m/l}), \\ \alpha(0) &= \alpha = a + \Delta_0, \quad \Delta_0 \equiv \Delta(0), \\ q_L^2 &= \kappa/2\tau, \quad \delta = \tau b^2(3b^2 - 4q_L^2). \end{aligned} \quad (3)$$

Отметим, что величина  $q_L^2$  определяет положение *LT*-точки относительно других реперных точек на фазовой диаграмме (на оси  $D$ ).

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Мягкая оптическая ветвь, определяемая формулами (1) или (2), является двукратно вырожденной, поскольку  $\alpha(q) = \alpha(-q)$ . Следовательно, параметр порядка – двухкомпонентный. Компоненты  $\eta$  и  $\xi$  можно рассматривать как амплитуды двух мод с  $q$  и  $-q$ , которые принадлежат этой ветви. Используя более удобную полярную систему координат  $\eta = \rho \cos \varphi$  и  $\xi = \rho \sin \varphi$ , запишем термодинамический потенциал в виде

$$\Phi = \alpha(q)r^2 + \beta\rho^4 + \gamma\rho^6 - \alpha'_l\rho^{2l} \cos 2l\varphi, \quad (4)$$

где  $\alpha(q)$  берется по формуле (1) или (2) (не следует путать зависимость  $\alpha(q)$  и коэффициент  $\alpha$ ). Коэффициент  $\alpha'_l$  при анизотропном (в пространстве  $\eta$ ,  $\xi$ ) инвариантен от нуля только для рациональных значений  $q = q_{m/l} = m/l$ , где  $m$  и  $l$  – целые числа.

Для  $IC$ -фазы потенциал принимает вид

$$\Phi_{IC} = \alpha(b)\rho^2 + \beta\rho^4 + \gamma\rho^6; \quad \alpha(b) = a. \quad (5)$$

Минимизируя потенциал (4) по  $\varphi$ , получим два решения:  $\sin l\varphi = 0$ , устойчивое при  $\alpha'_l > 0$ , и  $\cos l\varphi = 0$ , устойчивое при  $\alpha'_l < 0$ . Потенциал соподразмерной фазы  $C_l$  для обоих решений приобретает вид

$$\Phi_{m/l} = \alpha(q_{m/l})\rho^2 + \beta\rho^4 + \gamma\rho^6 - |\alpha'_l|\rho^{2l}. \quad (6)$$

Для  $C_0$ -фазы с  $q = 0$ , эквивалентной с  $C$ -фазой, потенциал имеет вид

$$\Phi_0 = \alpha\zeta^2 + (2/3)\beta\zeta^4 + (2/5)\gamma\zeta^6. \quad (7)$$

Параметр порядка  $\zeta$  в этом случае однокомпонентный. Численные множители при коэффициентах  $\beta$  и  $\gamma$  связаны именно с этим обстоятельством. Подробный вывод выражения (7), исходя из требования его согласованности с выражениями (5) и (6), можно найти, например, в [5]. Потенциал исходной  $C$ -фазы  $\Phi_C = 0$ .

В дальнейшем оказывается удобным использовать следующие безразмерные переменные  $\phi$ ,  $R$  и параметры  $A$ ,  $B$ ,  $Q_L$ ,  $Q_l$ ,  $D_l$ ,  $D_0$ ,  $D$ ,  $A_l$ ,  $A_\gamma$ :

$$\begin{aligned}\Phi &= \phi F_0, \quad \rho = RR_0, \quad \zeta = RR_0, \\ F_0 &= (\tau Q^6)^2 / \beta, \quad R_0^2 = \tau Q^6 / \beta, \quad a = -A\tau Q^6, \\ b &= BQ, \quad q_L = Q_L Q, \quad q_{m/l} = Q_l Q, \\ \Delta_{m/l} &= D_l \tau Q^6, \quad \Delta_0 = D_0 \tau Q^6, \quad \delta = D \tau Q^4, \\ |\alpha_l| &= (2\beta A_l)^{l-1} / (\tau Q^6)^{l-2}, \quad |\alpha_3| = (2\beta A_3)^2 / \tau Q^6, \\ \gamma &= (2\beta A_\gamma)^2 / \tau Q^6.\end{aligned}\quad (8)$$

Здесь  $Q = 0.5$  — число, вводимое для меньшего разброса в задаваемых численных значениях параметров. Для удобства знак  $A$  берется противоположным знаку  $a$  (фазовая  $D$ - $A$ -диаграмма).

Термодинамические потенциалы (5)–(7) в обозначениях (8) принимают более простой вид

$$\begin{aligned}\phi_{IC} &= -AR^2 + R^4 + 4A_\gamma^2 R^6, \\ \phi_{m/l} &= -(A - D_l)R^2 + R^4 + 4A_\gamma^2 R^6 - (2A_l)^{l-1} R^{2l}, \quad (9) \\ \phi_0 &= -(A - D_0)R^2 + (2/3)R^4 + (8/5)A_\gamma^2 R^6.\end{aligned}$$

Варьируя потенциалы (9) по переменной  $R$  и тем самым исключая ее, получим

$$\begin{aligned}\phi_{IC} &= -(1/6^3 A_\gamma^4) \{ [1 + 12A_\gamma^2 A]^{3/2} - [1 + 18A_\gamma^2 A] \}, \\ \phi_0 &= -(1/0.54 \times 6^3 A_\gamma^4) \times \\ &\times \{ [1 + 0.9 \times 12A_\gamma^2 (A - D_0)]^{3/2} - \\ &- [1 + 0.9 \times 18A_\gamma^2 (A - D_0)] \}, \\ \phi_{1/3} &= -[1/6^3 (A_\gamma^2 - A_3^2)] \times \\ &\times \{ [1 + 12(A_\gamma^2 - A_3^2)(A - D_3)]^{3/2} - \\ &- [1 + 18(A_\gamma^2 - A_3^2)(A - D_3)] \}, \quad (A_\gamma^2 - A_3^2 > 0), \\ \phi_{1/3} &= -(1/6^3) 54(A - D_3)^2, \quad (A_\gamma^2 = A_3^2), \\ \phi_{m/l} &= -(1/6^3 A_\gamma^4) \{ [1 + 12A_\gamma^2 (A - D_l)]^{3/2} - \\ &- [1 + 18A_\gamma^2 (A - D_l)] \} - (1/2A_l) [A_l / 6A_\gamma^2]^l \times \\ &\times \{ [1 + 12A_\gamma^2 (A - D_l)]^{1/2} - l \}^l, \quad (l > 3).\end{aligned}\quad (10)$$

В выражении для  $\Phi_{m/l}$  ( $l > 3$ ) второе слагаемое предполагается малым по сравнению с первым (условие слабой анизотропии), по нему проводится разложение.

### ГРАНИЦЫ МЕЖДУ ФАЗАМИ

Приравнивая потенциалы (10) друг к другу, получим выражения для границ между фазами. Поскольку потенциал  $C$ -фазы  $\Phi_C = 0$ , то для границ  $C$ - $IC$  и  $C$ - $C_0$  получаются простые выражения, соответственно

$$A = 0, \quad A = D_0. \quad (11)$$

Выражения для других границ приводить не имеет смысла: это сводится лишь к многократному переписыванию потенциалов (10), приравненных друг к другу (сократится лишь общий множитель  $6^3$ , а также  $A_\gamma^4$  — кроме границ с фазой  $C_3$ ). В дальнейшем будем ссылаться на потенциалы (10) как на выражения для границ между фазами.

Отметим, что три границы  $C$ - $IC$ ,  $C$ - $C_0$  и  $IC$ - $C_0$  сходятся в одной точке, названной  $LT$ -точкой. Также пересекаются в одной точке (как и должно быть) три другие границы  $IC$ - $C_3$ ,  $IC$ - $C_0$  и  $C_3$ - $C_0$ .  $LT$ -точке отвечают значения

$$A = 0, \quad B^2 = Q_L^2, \quad D_0 = 0, \quad D = -Q_L^4. \quad (12)$$

Приведем еще выраженные через  $B^2$  величины  $D$ ,  $D_0$ ,  $D_l$ ,  $D_3$ , которые входят в потенциалы (10). Согласно (2), (3) и (8):

$$\begin{aligned}D &= B^2(3B^2 - 4Q_L^2), \quad D_0 = 2B^4(B^2 - Q_L^2), \\ D_l &= (B^2 - Q_l^2)^2[2(B^2 - Q_L^2) + Q_l^2], \\ D_3 &= (B^2 - 4/9)^2[2(B^2 - Q_L^2) + 4/9].\end{aligned}\quad (13)$$

### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФАЗОВАЯ $D$ - $A$ -ДИАГРАММА

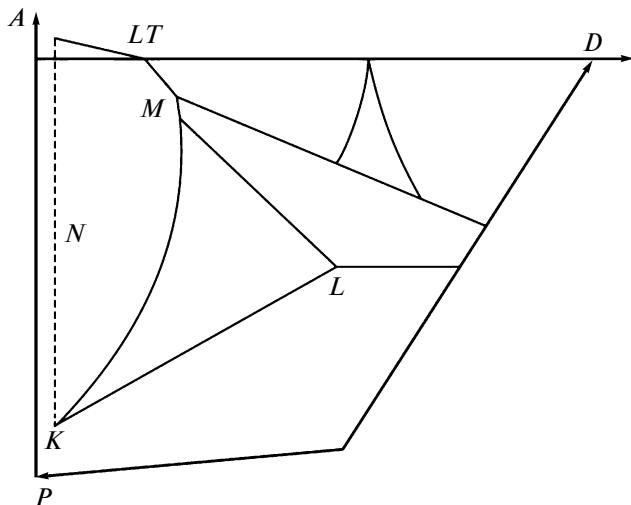
Выражения (11), (12) для границ между различными фазами позволяют строить теоретические фазовые диаграммы. Сначала будет построена фазовая диаграмма на плоскости двух коэффициентов термодинамического потенциала  $A$  и  $D$  (8). В качестве оси абсцисс удобно выбрать коэффициент  $D$ , а оси ординат — коэффициент  $A$ . При значении  $A = 0$  осуществляется  $\Phi$ П второго рода из  $C$  в  $IC$ -фазу.

Выбираем простейшие значения задаваемых параметров (далее обсуждается выбор значений  $A_\gamma$  и  $A_3$ ):  $Q_L^2 = 0.5$  [4],

$$A_\gamma = A_3 = A_5 = 1. \quad (14)$$

Численное значение величины  $A_l$  для каждой  $C_l$ -фазы определяет ее относительную ширину на диаграмме. Численное значение величины  $Q_L$  определяет положение  $LT$ -точки относительно других реперных точек на оси  $D$ .

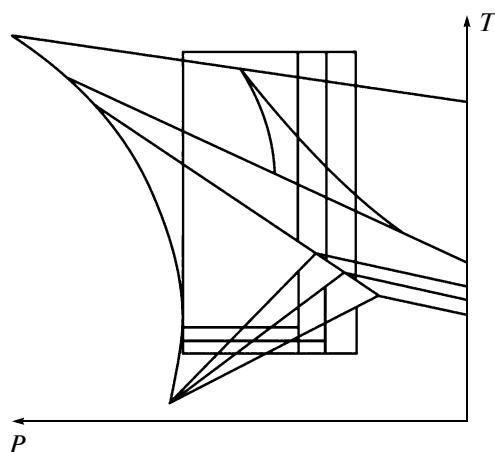
Для построения  $D$ - $A$ -диаграммы задаем последовательно различные значения  $B^2$ . Из (13) определяем соответствующие значения  $D$ ,  $D_0$ ,  $D_l$ , которые входят в (10). Из (10) методом последовательных приближений находим значения  $A$ . Метод состоит в том, что для выбранного значения  $B^2$  задается приблизительно ожидаемое значение  $A$ . Подставляем его в уравнение равенства двух потенциалов (10), левая и правая части которого, очевидно, не равны друг другу. Уточняем задаваемое значение  $A$  и так до тех пор, пока не

Рис. 3. Теоретическая фазовая  $D$ - $A$ -диаграмма.

определим значение  $A$  с достаточной точностью. Затем проделываем то же самое с другим значением  $B^2$ . Строим по точкам фазовую  $D$ - $A$ -диаграмму (рис. 3).

Подчеркнем, что  $D$ - $A$ -диаграмма ограничена слева значением  $D = -(4/3)Q_L^4 = -1/3$  или  $B^2 = (2/3)Q_L^2 = 1/3$ . При  $D < -1/3$  величина  $B^2$  становится комплексной, как это следует из (13) (рис. 2а и пояснения к нему в тексте). Пунктирной линией, параллельной оси  $A$ , на рис. 3 отмечена граница применимости рассматриваемого подхода, основанного на использовании координат мягкой моды  $a$  и  $b$  (3) или  $A$  и  $B$  (8). Левее пунктирной линии располагается область неприменимости подхода. Масштабы вдоль осей  $D$  и  $A$  выбраны: 400  $D$  и 200  $A$ . Точка  $LT$  показана на рис. 3. При  $D < D_{LT}$   $IC$ -фаза на диаграмме отсутствует.

Поясним наличие двух  $C_3$ -фаз на рис. 1. Простейшая фазовая диаграмма с фазами  $C$ ,  $C'_3$  и  $C''_3$  представляет собой пересечение двух осей. Вдоль оси абсцисс отложен коэффициент  $A$ , вдоль оси ординат — коэффициент  $|A_3|$ . Применение модуля обусловлено тем, что в потенциале  $C_3$ -фазы (6) коэффициент  $\alpha_3$  входит по модулю:  $|\alpha_3|$ .  $A_3$  является перенормированным коэффициентом  $\alpha_3$  (8). Исходная  $C$ -фаза расположена правее оси  $|A_3|$  при  $A > 0$ . Фазы  $C'_3$  и  $C''_3$  расположены при  $A < 0$  соответственно выше и ниже оси  $A$ . Для того чтобы произошел фазовый переход  $C'_3-C''_3$ , фазовая траектория должна начинаться внутри фазы  $C'_3$  (например при значении  $|A_3| = 1$ ), опускаться до оси  $A$ , которая и является линией фазового перехода  $C'_3-C''_3$  первого рода, и опускаться далее в об-

Рис. 4. Теоретическая фазовая  $T$ - $P$ -диаграмма, полученная из рис. 3, с выделенным на ней прямоугольным фрагментом.

ласть фазы  $C''_3$ . Для фазового перехода  $C''_3-C'_3$  справедливо все то же самое с точностью до набора.

На фазовой  $D$ - $A$ -диаграмме (рис. 3) коэффициент  $A_3$  монотонно уменьшается от значения  $A_3 = 1$  в точке  $K$  до значения  $A_3 = 0$  в точке  $L$ . Аналогично коэффициент  $A_3$  монотонно уменьшается от  $A_3 = 1$  в точке  $M$  до  $A_3 = 0$  в точке  $L$ .

Коэффициент  $A$ , как и любой коэффициент термодинамического потенциала, зависит от  $T$  и  $P$ . Поскольку трудно связать изменение коэффициента  $A_3$  непосредственно с  $T$  и  $P$ , он связан на рис. 3 с изменением коэффициента  $A$ . Из точки  $L$  на рис. 3 идет линия  $\Phi\Gamma$  первого рода  $C'_3-C''_3$ . Принимаем, что эта линия является продолжением линии  $N-L$ , ортогональной к оси  $A$ .

### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФАЗОВАЯ $T$ - $P$ -ДИАГРАММА

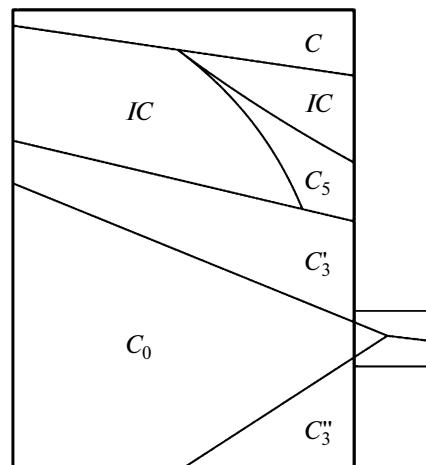
Предполагаем линейную зависимость коэффициентов  $D$  и  $A$  от  $T$  и  $P$ . Тогда оси  $T$  и  $P$  на рис. 3 — прямые линии. Из разумных соображений выбираем их ориентацию. Теперь на основе  $D$ - $A$ -диаграммы рис. 3 можно строить  $T$ - $P$ -диаграмму. Построенная так  $T$ - $P$ -диаграмма представлена на рис. 4. На этом рисунке выделен фрагмент диаграммы, который будет сопоставляться с рис. 1. Он может быть выбран разной ширины (на рис. 4 представлено три разных варианта выбора). Один из них показан на рис. 5. Его размеры вдоль осей  $T$  и  $P$  приведены в соответствие с рис. 1.

Из сравнения рис. 1 с рис. 5 видно их неудовлетворительное согласие в верхней половине рисунков, в области  $IC$ -фазы. Были предприняты

разные попытки улучшить согласие. Брались другие масштабы вдоль оси  $D$ :  $600D$ ,  $800D$ . Менялись на рис. 3 ориентации осей  $T$  и  $P$ . Наиболее существенным оказалось изменение по сравнению с (14) значений  $A_\gamma$  и  $A_3$ . Они брались разными по величине, меньшими и большими (незначительно). Но все это не помогло получить лучшего согласия рис. 1 и 5, в особенности это касается ширины  $IC$ -фазы.

Для того чтобы сузить  $IC$ -фазу на  $D$ - $A$ -диаграмме рис. 3, нужно взять значения  $A_\gamma$  и  $A_3$  большими, чем (14). Во сколько раз они будут больше, во столько раз приблизительно сузится  $IC$ -фаза. Однако брать слишком большие значения  $A_\gamma$  и  $A_3$  нельзя из-за ограничения применимости рассматриваемого подхода. Уже при небольшом увеличении, например  $A_\gamma = A_3 = 2$ , граница  $C_0 - C_3$  упирается в пунктирную линию, т.е. в запретную зону, при значении  $200A = 52$ , вместо  $200A = 131$  при  $A_\gamma = A_3 = 1$  (14). При столь малом значении  $A$  не удается выделить фрагмент фазовой диаграммы, сопоставимый с рис. 1. Можно сказать, что лучшего согласия верхней половины рис. 1 и рис. 5 не удается добиться из-за ограниченности подхода, использующего координаты мягкой моды  $A$  и  $B$ .

Однако существенно то, что согласие рис. 1 и 5 в нижней их половине можно признать удовлетворительным. Малым горизонтальным прямоугольником справа от основного вертикального прямоугольника на рис. 5 выделена область  $T$ - $P$ -диаграммы, которая могла бы наблюдаваться в



**Рис. 5.** Теоретическая фазовая  $T$ - $P$ -диаграмма, полученная из рис. 4 и приведенная по размерам к  $T$ - $P$ -диаграмме рис. 1.

$d$ -кристалле  $[\text{N}(\text{CD}_3)_4]_2\text{ZnCl}_4$ . Получение этой области и являлось целью данной работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shimizu H., Kokubo N., Yasuda N. et al. // J. Phys. Soc. Jpn. 1980. V. 49. P. 223.
2. Gesi K. // Ferroelectrics. 1986. V. 66. P. 269.
3. Cummins H.Z. // Phys. Rep. 1990. V. 185. P. 211.
4. Sannikov D.G., Mashiyama H. // J. Phys. Soc. Jpn. 2000. V. 69. P. 130.
5. Санников Д.Г. // Кристаллография. 1999. Т. 44. № 1. С. 158.