

О ЗАКОНЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ЗАРЯЖЕННЫМИ ДЕФЕКТАМИ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

А. Н. Вараксин, Ю. Н. Колмогоров

УДК 548.4 : 548.571
© 1990

Методом Мотта—Литтлтона в гармоническом приближении рассчитаны энергии взаимодействия $E_{\text{int}}^{PC}(R_{12})$ между доминирующими дефектами в кристаллах типа NaCl и типа CaF₂. Показано, что взаимодействие между катионной и анионной вакансиями в кристаллах типа NaCl описывается законом Кулона для взаимодействия зарядов в диэлектрике вплоть до самых малых расстояний R_{12} между вакансиями. Хорошее совпадение $E_{\text{int}}^{PC}(R_{12})$ с расчетом по формуле Кулона следует ожидать для анионной пары Френкеля в кристаллах типа CaF₂. Для других дефектов на малых расстояниях R_{12} возможны отклонения от закона Кулона; степень отклонения зависит от типа решетки, типа дефекта и относительной поляризуемости катионной и анионной подрешеток кристалла. Расчеты $E_{\text{int}}^{PC}(R_{12})$ методом Мотта—Литтлтона сопоставлены с расчетами по программе MOLSTAT, выполненными методом молекулярной статистики.

Взаимодействие между заряженными дефектами определяет многие свойства ионных кристаллов и разнообразные процессы, происходящие в них. Так, взаимодействие между собственными дефектами приводит к уменьшению энергии их образования, быстрому росту концентрации дефектов с ростом температуры, что ведет к плавлению кристаллов (например, кристаллов типа NaCl [1]) или переходу кристаллов в супер-ионное состояние (например, кристаллов типа CaF₂ [2]). Другой пример — взаимодействие компенсирующих вакансий с иновалентными примесями замещения в щелочно-галогидных кристаллах. Это взаимодействие приводит к образованию фаз Сузуки, влияет на электропроводность кристаллов и диффузию в них самих иновалентных примесей [3].

Основой теоретического описания перечисленных процессов является закон взаимодействия между двумя элементарными дефектами, т. е. зависимость энергии взаимодействия дефектов $E_{\text{int}}(R_{12})$ от расстояния R_{12} между ними. Энергия взаимодействия двух дефектов определяется как

$$E_{\text{int}}(R_{12}) = E_2(R_{12}) - E_{10} - E_{20}, \quad (1)$$

где $E_2(R_{12})$ — энергия образования пары дефектов на расстоянии R_{12} друг от друга; E_{10} , E_{20} — энергии образования одиночных изолированных дефектов.

Если расстояние между дефектами велико по сравнению с межионным расстоянием a_0 , то в диэлектрических кристаллах за счет поляризации среды между дефектами энергия взаимодействия E_{int} должна подчиняться закону Кулона

$$E_{\text{int}}^{\text{Coul}}(R_{12}) = \frac{Q_{d1} \cdot Q_{d2}}{\epsilon_0 R_{12}}, \quad (2)$$

где Q_{d1} , Q_{d2} — заряды дефектов; ϵ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость кристалла.

Изучению зависимости $E_{\text{int}}(R_{12})$ посвящено значительное число работ. Эти работы можно разделить на две группы: первая группа работ посвя-

щена аналитическому расчету $E_{\text{int}}(R_{12})$ и определению закона взаимодействия между дефектами (см., например, [4], [5]); вторая группа работ — расчеты на ЭВМ методом молекулярной статистики численных значений $E_{\text{int}}(R_{12})$ для малых [6, 7] и произвольных [8, 9] расстояний между дефектами.

В обзоре [4] приведены результаты расчетов энергий взаимодействия E_{int} между дефектами, помещенными в узлы кристаллической решетки NaCl, KCl и KBr. Для расчета безынерционной (электронной) поляризации использована модель точечных диполей; инерционная поляризация (поляризация смещения) вычислялась в модели точечных ионов. Оказалось, что рассчитанные по данной методике энергии взаимодействия примерно в 1.5 раза отличаются от $E_{\text{int}}^{\text{Coul}}(2)$ для расстояния $R_{12} = a_0$. С увеличением R_{12} до $\sqrt{3} a_0$ отличие E_{int} [4] от $E_{\text{int}}^{\text{Coul}}(2)$ уменьшается, но не исчезает полностью. В работе [5] рассчитаны энергии взаимодействия двух зарядов в LiF с учетом только электронной поляризации кристалла, полученной в экситонном представлении. Показано, что $E_{\text{int}}(R_{12}) = Q_{d1}Q_{d2}/\epsilon_{\infty}^{\text{eff}}(R_{12}) \cdot R_{12}$. Введенная здесь «эффективная» высокочастотная диэлектрическая проницаемость LiF ведет себя следующим образом: при $R_{12} \rightarrow 0$ $\epsilon_{\infty}^{\text{eff}}(R_{12}) \rightarrow 1$ (получается взаимодействие зарядов в вакууме); с увеличением R_{12} функция $\epsilon_{\infty}^{\text{eff}}(R_{12})$ возрастает практически линейно и достигает макроскопического предела $\epsilon_{\infty}^{\text{eff}} \rightarrow \epsilon_{\infty} \simeq 1.93$ на расстояниях $R_{12} \sim (3 \div 4)a_0$. Отсюда, в частности, следует, что при $R_{12} = a_0$ энергия взаимодействия E_{int} отличается от макроскопического предела $Q_{d1}Q_{d2}/\epsilon_{\infty}a_0$ примерно в 1.5 раза. В работах, в которых применяется метод молекулярной статистики, показано, что энергия взаимодействия между катионной и анионной вакансиями в MgO [6] и в щелочно-галогидных кристаллах на расстояниях $R_{12} = a_0$ [7] и на произвольных расстояниях R_{12} [8, 9] очень хорошо совпадает с расчетами по формуле (2). С точки зрения результатов работы [5], данное совпадение кажется необъяснимым или случайным.

В настоящей работе вывод закона взаимодействия $E_{\text{int}}(R_{12})$ производится методом Мотта—Литтлтона [10] в гармоническом приближении по смещениям ξ_j ионов решетки для энергии поляризации решетки и в линейном по ξ_j приближении для энергии «дефект—решетка» [11, § 8.2] (в дальнейшем для краткости будем говорить просто «гармоническое приближение»). В этом приближении энергия образования дефекта E записывается в виде суммы энергии E^{ad} образования дефекта в решетке без релаксации и изменения энергии кристалла с дефектом за счет релаксации (поляризации) решетки

$$E = E^{\text{ad}} - \frac{1}{2} \sum_j F_j \xi_j, \quad (3)$$

где F_j — сила, действующая на j -ион решетки со стороны дефекта и приводящая к смещению j -иона на величину ξ_j .

Рассмотрим вначале взаимодействие между катионной V_k и анионной V_a вакансиями в кристалле типа NaCl, которые для данного типа кристаллов являются доминирующими собственными дефектами структуры. Запишем энергии образования вакансий V_k , V_a и пары $(V_k - V_a)$ на расстоянии R_{12} , используя соотношение (3) и оболочечную модель иона Дика—Оверхаузера [12]

$$E_{10} = E_{10}^{\text{ad}} - \frac{1}{2} Q_{d1} \sum_{j \neq 1} (q_j^s \xi_{j1}^s + q_j^c \xi_{j1}^c) \frac{R_{1j}}{|R_{1j}|^3}, \quad (4)$$

$$E_{20} = E_{20}^{\text{ad}} - \frac{1}{2} Q_{d2} \sum_{j \neq 2} (q_j^s \xi_{j2}^s + q_j^c \xi_{j2}^c) \frac{R_{2j}}{|R_{2j}|^3}, \quad (5)$$

$$E_2(R_{12}) = E_{\text{эд}}^2(R_{12}) - \frac{1}{2} \sum_{j \neq 1, 2} \{q_j^s (\xi_{j1}^s + \xi_{j2}^s) + q_j^c (\xi_{j1}^c + \xi_{j2}^c)\} \times \\ \times \left(Q_{d1} \frac{R_{1j}^s}{|R_{1j}^s|^3} + Q_{d2} \frac{R_{2j}^c}{|R_{2j}^c|^3} \right), \quad (6)$$

где R_{1j} , R_{2j} — расстояния от вакансий до j -ионов решетки; q_j^s , q_j^c — заряды оболочек и ядер ионов; ξ_j^s , ξ_j^c — соответствующие смещения. В формуле (6), кроме того, предполагается, что смещения ξ_j^s и ξ_j^c , обусловленные парой $(V_k - V_a)$, являются векторной суммой смещений, обусловленных каждой вакансией в отдельности.

В рамках оболочечной модели статическая поляризуемость α_0 кристалла типа NaCl выражается в виде [12, 13]

$$\alpha_0 = \frac{(q_k^c)^2}{\mathcal{K}_k} + \frac{(q_a^c)^2}{\mathcal{K}_a} + \frac{Q^2}{P_0}, \quad (7)$$

где q_k^c , q_a^c — заряды ядер катионов и анионов; \mathcal{K}_k , \mathcal{K}_a — константы связи «ядро—оболочка»; $\pm Q$ — заряд иона; параметр P_0 определяет способность оболочки иона смещаться из положения равновесия под действием дефекта. Отсюда можно предположить, что член Q^2/P_0 отвечает за поляризацию смещения, а члены $(q_k^c)^2/\mathcal{K}_k$ и $(q_a^c)^2/\mathcal{K}_a$ — за электронную поляризацию кристалла. В приближении Мотта—Литтлтона поляризация смещения кристалла делится поровну между катионной и анионной подрешетками кристалла. Эти рассуждения позволяют нам формально написать

$$\alpha_0 = \alpha_k + \alpha_a, \quad (8)$$

где

$$\alpha_k = \frac{(q_k^c)^2}{\mathcal{K}_k} + \frac{Q^2}{2P_0}, \quad \alpha_a = \frac{(q_a^c)^2}{\mathcal{K}_a} + \frac{Q^2}{2P_0} \quad (9), (10)$$

— статические поляризуемости катионной и анионной подрешетки кристалла.

Представим смещения ξ_j^s и ξ_j^c в приближении Мотта—Литтлтона; это позволяет сделать преобразование

$$(q_j^s \xi_j^s + q_j^c \xi_j^c) \frac{R_j}{|R_j|^3} = \alpha_j Q_d \left(\frac{\varepsilon_0 + 2}{3\varepsilon_0} \right) \frac{1}{|R_j|^4}, \quad (11)$$

$\alpha_j = \alpha_k$ либо $\alpha_j = \alpha_a$. Тогда энергия взаимодействия

$$E_{\text{int}}(R_{12}) = \frac{Q_{d1} Q_{d2}}{R_{12}} - Q_{d1} Q_{d2} \left(\frac{\varepsilon_0 + 2}{3\varepsilon_0} \right) \sum_{j \neq 1, 2} \alpha_j \frac{(R_{1j} R_{2j})}{|R_{1j}^s|^3 |R_{2j}^c|^3} + \\ + \frac{1}{2} (Q_{d1}^2 \alpha_k + Q_{d2}^2 \alpha_a) \left(\frac{\varepsilon_0 + 2}{3\varepsilon_0} \right) \frac{1}{|R_{12}|^4}. \quad (12)$$

Введем обозначение решеточной суммы (PC)

$$S_{\pm}^{\dagger} = \sum_{j \neq 1, 2} \frac{(R_{1j} R_{2j})}{|R_{1j}^s|^3 |R_{2j}^c|^3}, \quad (13)$$

где суммирование ведется только по катионам, окружающим дефекты. Аналогичную сумму по анионам обозначим S_{\pm}^{-} . В этом случае

$$E_{\text{int}}^{PC}(R_{12}) = \frac{Q_{d1} Q_{d2}}{R_{12}} - Q_{d1} Q_{d2} \left(\frac{\varepsilon_0 + 2}{3\varepsilon_0} \right) (\alpha_k S_{\pm}^{\dagger} + \alpha_a S_{\pm}^{-}) + \\ + \frac{1}{2} (Q_{d1}^2 \alpha_k + Q_{d2}^2 \alpha_a) \left(\frac{\varepsilon_0 + 2}{3\varepsilon_0} \right) \frac{1}{R_{12}^4}. \quad (14)$$

Дальнейшее преобразование (14) возможно при определенных условиях и допущениях. Для пары $(V_k - V_a)$ в кристалле типа NaCl выполняется соотношение

$$S_4^+ = S_4^- \equiv S_4,$$

а также $Q_{a1} = -Q_{a2} \equiv Q_a$. Тогда, используя соотношение Клаузиуса—Мосотти [11]

$$\alpha_k + \alpha_a = \frac{3v_c}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_1 - 1}{\epsilon_0 + 2} \right),$$

из (14) получаем

$$E_{\text{int}}^{PC}(R_{12}) = -\frac{Q_a^2}{R_{12}} + Q_a^2 \frac{v_c}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(S_4 + \frac{1}{2R_{12}^2} \right), \quad (15)$$

где v_c — объем элементарной ячейки кристалла.

Таблица 1

Проверка континуального приближения для S_4 -суммы и энергия взаимодействия дефектов в кристалле KBr

R_{12}	а) Пара вакансий $(V_k - V_a)$					
	$S_4 + \frac{1}{2R_{12}^2}$	$\frac{2\pi}{R_{12}}$	E_{int}^{PC} , эВ формула (15)	$E_{\text{int}}^{\text{coll}}$, эВ формула (2)	E_{int}^{MS} , эВ	
1	6.27	6.28	-0.92	-0.92	-0.93	
$\sqrt{3}$	3.83	3.63	-0.43	-0.53	-0.47	
$\sqrt{5}$	2.82	2.81	-0.41	-0.41	-0.44	
3	2.10	2.09	-0.31	-0.31	-0.32	
$\sqrt{11}$	1.91	1.89	-0.27	-0.28	-0.27	
$\sqrt{17}$	1.54	1.52	-0.21	-0.22	-0.22	
б) Пара анионных вакансий $(V_a - V_a)$						
	S_4^-	$S_4^- - \frac{1}{R_{12}^2}$	$\frac{2\pi}{R_{12}}$	E_{int}^{PC} , эВ формулы (17)–(18)	$E_{\text{int}}^{\text{coll}}$, эВ формула (2)	E_{int}^{MS} , эВ
$\sqrt{2}$	4.74	4.07	4.44	+0.63	0.65	0.58
2	2.78	3.21	3.14	+0.53	0.46	0.52
$\sqrt{6}$	2.60	2.61	2.57	+0.36	0.38	0.37
$\sqrt{10}$	1.98	2.03	1.99	+0.28	0.29	0.28
$\sqrt{18}$	1.49	1.50	1.48	+0.21	0.22	0.21

Примечание. $v_c = 2a_0^3$, $a_0 = 3.26 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 4.52$, $Q = 0.97 e$, e — заряд электрона [13]; параметры R_{12} и S_4 приведены в системе единиц $a_0 = 1$.

В табл. 1а представлены результаты расчетов величины $(S_4 + 1/2R_{12}^2)$, выполненных для кристалла структуры NaCl прямым суммированием по решетке. Видно, что для всех R_{12} величина $(S_4 + 1/2R_{12}^2)$ очень хорошо совпадает со своим континуальным пределом (когда сумма по ионам в S_4 (13) заменяется интегралом по объему и $R_{12} \gg a_0$)

$$S_4 + \frac{1}{2R_{12}^2} \approx \frac{4\pi}{v_c} \frac{1}{R_{12}}. \quad (16)$$

Если же подставить (16) в (15), то получается закон Кулона (2).

Проведенные вычисления показывают, что выполнение закона Кулона (2) для взаимодействия катионной и анионной вакансий в кристаллах со структурой NaCl вплоть до самых малых расстояний R_{12} между вакансиями является не случайным, а вполне закономерным следствием

поляризации кристалла вокруг вакансий, но не между ними (на малых R_{12} между вакансиями ничего нет).

Катионная и анионная вакансии, являясь противоположно заряженными дефектами, притягиваются друг к другу, и энергия их взаимодействия отрицательна. Рассмотрим теперь взаимодействие одноименно заряженных дефектов в кристалле типа NaCl, например взаимодействие двух анионных вакансий V_a . Повторяя проделанные выкладки, получаем

$$E_{int}^{PC}(R_{12}) = \frac{Q_d^2}{R_{12}} - Q_d^2 \left(\frac{\epsilon_0 + 2}{3\epsilon_0} \right) [\alpha_k S_4^+ + \alpha_a (S_4^-)'], \quad (17)$$

где

$$(S_4^-)' = S_4^- - 1/R_{12}^4, \quad (18)$$

а S_4^+ и S_4^- определены, как обычно, по формулам типа (13) с учетом расположения пары ($V_a - V_a$) в кристаллической решетке. Данные табл. 16 показывают, что теперь на малых расстояниях между дефектами $S_4^+ \neq (S_4^-)'$ и не совпадает с континуальным пределом (16). Таким образом, для пары ($V_a - V_a$) в кристаллах типа NaCl можно ожидать сильного отклонения $E_{int}(R_{12})$ от закона Кулона (2), причем величина отклонения будет зависеть от соотношения α_k и α_a . Например, для кристалла KBr поляризуемости ионов в кристалле $\alpha_k \approx \alpha_a$, в результате чего для $R_{12} = \sqrt{2} a_0$ получается $E_{int}^{PC} \approx E_{int}^{coul}$, а для вакансий, являющихся вторыми соседями ($R_{12} = 2a_0$), имеется отличие E_{int}^{PC} и E_{int}^{coul} . Если для некоторого кристалла $\alpha_a \gg \alpha_k$, то ситуация будет обратной (различие E_{int}^{PC} и E_{int}^{coul} для ближайших соседей и совпадение для вторых соседей).

В последнем столбце табл. 1 приведены результаты расчета энергий взаимодействия дефектов в KBr, вычисленные по программе MOLSTAT [9].

Таблица 2

Проверка континуального приближения для S_4^+ и $(S_4^-)'$ -сумм и энергия взаимодействия дефектов в кристалле SrCl₂

R_{12}	а) Пара Френкеля ($V_a - I_a$)					
	S_4^+	$\frac{1}{2} S_4^-$	$\frac{2\pi}{R_{12}}$	E_{int}^{PC} , эВ формулы (17), (19)	E_{int}^{coul} , эВ	E_{int}^{MS} , эВ
$\sqrt{11}/2$	3.64	3.82	3.79	-0.40	-0.37	-0.51
$\sqrt{19}/2$	3.01	2.89	2.88	-0.24	-0.28	-0.30
$\sqrt{27}/2$	2.40	2.42	2.42	-0.24	-0.24	-0.28
$\sqrt{35}/2$	2.11	2.13	2.12	-0.21	-0.21	-0.25
$\sqrt{51}/2$	1.77	1.76	1.76	-0.17	-0.17	-0.22
	б) Пара анионных вакансий ($V_a - V_a$)					
	S_4^+	$\frac{1}{2} (S_4^- - \frac{1}{R_{12}^4})$	$\frac{2\pi}{R_{12}}$	E_{int}^{PC} , эВ формулы (17), (20)	E_{int}^{coul} , эВ	E_{int}^{MS} , эВ
1	6.85	5.24	6.28	+0.77	0.61	0.75
$\sqrt{2}$	4.50	4.38	4.44	+0.43	0.43	0.44
$\sqrt{3}$	2.65	3.70	3.63	+0.59	0.35	0.40
2	3.30	3.00	3.14	+0.31	0.31	0.39
$\sqrt{5}$	2.86	2.80	2.81	+0.27	0.27	0.23
$\sqrt{6}$	2.56	2.58	2.57	+0.25	0.25	0.22

Примечание. $v_c = 2a_0^3$, $a_0 = 3.48 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 6.76$; параметры R_{12} , S_4^+ и $(S_4^-)'$ приведены в системе единиц $a_0 = 1$.

методом молекулярной статистики [7, 9]. Этот метод является на сегодняшний день одним из самых строгих и точных методов расчета E_{int} . Интересно отметить, что результаты, полученные этим методом, очень хорошо коррелируют с $E_{\text{int}}^{\text{PC}}$, полученными приближенным методом по формулам (15)–(18), что дает дополнительное обоснование этих формул.

В табл. 2 приведены результаты расчетов энергий взаимодействия дефектов в кристалле SrCl_2 (структура флюорита); рассмотрены пары дефектов $V_a - J_a$ (анионный дефект Френкеля) и $(V_a - V_a)$. Расчеты $E_{\text{int}}^{\text{PC}}$ выполнены по формуле (17), где $(S_4^-)' = 1/2 S_4^-$ для дефекта Френкеля (мы считали приближенно, что поляризуемости α_{aI} междоузельного аниона и α_a аниона в узле одинаковы) и $(S_4^-)' = 1/2 (S_4^- - 1/R_{12}^4)$ для пары анионных вакансий.

Как видно из табл. 2, для пары Френкеля имеет место хорошее совпадение $E_{\text{int}}^{\text{PC}}$ и $E_{\text{int}}^{\text{coul}}$. Энергии взаимодействия, рассчитанные методом молекулярной статистики, отличаются в основном для ближайшего $R_{12} = a_0 \sqrt{11}/2$ (это обусловлено, вероятнее всего, нашим приближением $\alpha_{aI} = \alpha_a$). Для пары $(V_a - V_a)$ ситуация сложнее. Во-первых, имеется очень сильное отличие $E_{\text{int}}^{\text{PC}}$ и $E_{\text{int}}^{\text{coul}}$ для третьих (т. е. достаточно далеких) соседей, когда все отличия $E_{\text{int}}^{\text{PC}}$ и $E_{\text{int}}^{\text{coul}}$, как правило, исчезают. Во-вторых, имеется сильное рассогласование $E_{\text{int}}^{\text{PC}}$ и $E_{\text{int}}^{\text{MS}}$ для третьих и четвертых (тоже далеких) соседей. Причина этого пока не ясна и требует дальнейших исследований.

Рассмотрены условия выполнения закона Кулона (2) для энергии взаимодействия заряженных дефектов в диэлектрических кристаллах. Показано, что на расстояниях $R_{12} > 2a_0$ дефекты в кристаллах типа NaCl и CaF_2 взаимодействуют по закону Кулона. На малых расстояниях $R_{12} < 2a_0$ точность выполнения закона Кулона определяется тремя факторами: 1) типом решетки, 2) типом дефектов, 3) соотношением поляризуемостей катионной и анионной подрешеток кристалла. Показано, что наилучшим образом закон Кулона выполняется для пары равноименных вакансий в кристаллах типа NaCl и для пары Френкеля в кристаллах типа CaF_2 (любые кристаллы данных структур); напротив, наибольшего отклонения энергии взаимодействия дефектов от закона Кулона на малых расстояниях R_{12} следует ожидать для пары анионных вакансий в кристаллах со структурой CaF_2 .

Авторы благодарят Е. А. Котомина, Л. Н. Канторовича и А. Л. Шлюгера за дискуссии и обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] Kurosawa T. // J. Phys. Soc. Jap. 1957. V. 12. N 4. P. 338–346.
- [2] Huberman B. A. // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 32. N 18. P. 1000–1002.
- [3] Bannon N. M., Corish J., Jacobs P. W. M. // Phil. Mag. A. 1985. V. 51. N 6. P. 797–814.
- [4] Толпыго К. Б. // УФН. 1961. Т. 74. № 2. С. 269–288.
- [5] Канторович Л. Н. // Изв. АН ЛатвССР, сер. физ.-техн. наук. 1987. N 5. С. 18–24.
- [6] Catlow C. R. A., Faux I. D., Norgett M. J. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1976. V. 9. N 3. P. 419–429.
- [7] Catlow C. R. A., Corish J., Diller K. M., Jacobs P. W. M., Norgett M. J. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1979. V. 12. N 3. P. 451–464.
- [8] Колмогоров Ю. Н., Варакин А. Н., Волобуев П. В. // Тез. докл. IX Всес. конф. по физической химии и электрохимии ионных расплавов и твердых электролитов. Свердловск, 1987. Т. III. Ч. 1. С. 35–36.
- [9] Колмогоров Ю. Н., Варакин А. Н. // Деп. ВИНТИ, 1989. № 2395-B89. 137 с.
- [10] Mott N. F., Littleton M. J. // Trans. Faraday Soc. 1938. V. 34. N 3. P. 485–499.
- [11] Стоунхэм А. М. Теория дефектов в твердых телах. М., 1978. 569 с.
- [12] Dick B. G., Overhauser A. W. // Phys. Rev. 1958. V. 112. N 1. P. 90–103.
- [13] Sangster M. J. L., Schroder U., Atwood R. M. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1978. V. 11. N 8. P. 1523–1540.