

ИССЛЕДОВАНИЕ
МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО РЕЗОНАНСНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В КРИСТАЛЛЕ НАФТАЛИНА ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

К. П. Мелетов

Измерены спектры поглощения кристаллов нафталина и дейтеронафталина в области нижайшего синглетного экситонного перехода B_{31} для двух направлений поляризации света при 4.2 К и давлении до 5 ГПа. С увеличением давления наблюдаются значительное изменение интенсивности, сдвиг и увеличение давидовского расщепления экситонных полос. Определена зависимость сдвига D_p/D_0 и расщепления S_p/S_0 экситонных полос от изменения плотности P_p/P_0 : она хорошо описывается степенной функцией $S_p/S_0 = (P_p/P_0)^{8.9 \pm 1.2}$ и $D_p/D_0 = (P_p/P_0)^{4.4 \pm 0.8}$. Эти результаты однозначно указывают на близкостоящую природу сил межмолекулярного взаимодействия, неприменимость дипольного приближения для их описания и существенной роли недипольного кулоновского и электронного обменного взаимодействия для ближайших соседей.

В молекулярных кристаллах межмолекулярное взаимодействие значительно слабее внутримолекулярного и молекулы, образующие кристалл, сохраняют свою индивидуальность. По этой причине спектр кристалла отражает основные черты спектра свободной молекулы, однако межмолекулярное резонансное взаимодействие приводит к возникновению новых полос, соответствующих коллективным возбуждениям — экситонам Френкеля. Эти полосы были обнаружены впервые в кристалле нафталина [1], в котором электронный терм молекулы расщепляется на резко поляризованные полосы, соответствующие границам экситонного спектра: расщепление было объяснено Давыдовым [2] и получило название фактор-группового или давидовского расщепления экситонных полос. Согласно теории молекулярных экситонов [3], для кристалла с двумя молекулами в элементарной ячейке положение экситонных полос определяется формулой

$$\Delta E_{кр} = \Delta E_{мо.л} + D + L_{11}(\mathbf{k}=0) \pm L_{12}(\mathbf{k}=0). \quad (1)$$

Здесь $\Delta E_{кр}$ и $\Delta E_{мо.л}$ определяют разность энергий возбужденного и основного электронного состояний кристалла и свободной молекулы; D — разность энергий ван-дер-ваальсовского взаимодействия электронно-возбужденной молекулы с остальными молекулами кристалла; L_{11} определяет смещение экситонных уровней с $\mathbf{k}=0$, обусловленное резонансным взаимодействием трансляционно-эквивалентных молекул, а L_{12} — расщепление экситонных уровней с $\mathbf{k}=0$ и обусловлено резонансным взаимодействием трансляционно-неэквивалентных молекул. Сдвиг пар—кристалл D определяется ван-дер-ваальсовскими силами межмолекулярного взаимодействия и в простейшей модели, учитывающей главный член в мультипольном разложении, убывает с ростом межмолекулярного расстояния R пропорционально R^{-6} . Силы межмолекулярного резонансного взаимодействия, определяющие величины L_{11} и L_{12} , в простейшем дипольном приближении убывают пропорционально R^{-3} .

Исследование межмолекулярного взаимодействия основывается на экспериментах со всесторонним сжатием кристаллов, позволяющих изме-

нять расстояния между молекулами — один из параметров, определяющих это взаимодействие. Измерения оптических спектров при всестороннем сжатии проводились для молекулярных кристаллов тетрацена и пентацена [4, 5]. Детальное исследование зависимости от давления давидовского расщепления нижайшего синглетного экситонного и вбронных $0:1$ и $0:2$ переходов и сдвига полос в спектрах отражения кристалла антрацена было выполнено в работе [6] с использованием техники алмазных наковален. Для кристалла нафталина измерения спектров поглощения были проведены в области давлений до 1.5 ГПа и температуре 4.2 К [7]. В этих работах было установлено, что межмолекулярное взаимодействие является короткодействующим, быстро возрастает с уменьшением межмолекулярных расстояний и не описывается дипольным приближением. В связи с этим Уэлмсли были сделаны расчеты зависимости давидовского расщепления и сдвига полос от давления в рамках различных моделей взаимодействия, учитывающих недипольное взаимодействие и перекрывание электронных орбиталей взаимодействующих пар молекул, однако удовлетворительные результаты для кристалла нафталина были получены при значениях параметров парного взаимодействия, значительно отличающихся от экспериментальных [8, 9]. По этой причине нам представляется актуальным детальное экспериментальное исследование межмолекулярного взаимодействия для различных молекулярных кристаллов, отличающихся размером молекул, межмолекулярным расстоянием и силой осциллятора экситонного перехода, которое позволило бы установить характерные особенности и определить адекватные теоретические модели его описания. В настоящей работе мы приводим результаты многочисленных измерений поляризованных спектров поглощения кристаллов нафталина и дейтеронафталина в области нижайшего синглетного экситонного перехода при 4.2 К и давлении до 5 ГПа. По этим результатам определены зависимость давидовского расщепления и сдвига экситонных полос от давления и характер изменения сил межмолекулярного взаимодействия с уменьшением межмолекулярных расстояний. Полученные результаты однозначно указывают на короткодействующую природу этих сил и неприменимость дипольного приближения для их описания. Они свидетельствуют о существенном вкладе недипольного взаимодействия и электронного обменного взаимодействия в резонансные интегралы, определяющие экситонный транспорт и протяженность экситонных зон.

1. М е т о д и к а э к с п е р и м е н т а

Измерения спектров поглощения проводились при 4.2 К и давлении до 5 ГПа для двух направлений поляризации света, параллельно и перпендикулярно моноклинной *b*-оси кристалла. Всестороннее сжатие осуществлялось с помощью камеры высокого давления с сапфировыми и алмазными наковальнями. Специально ориентированные сапфировые наковальни использовались для поляризационных измерений в диапазоне давлений до 2.0 ГПа по методике [10], алмазные наковальни использовались до давления 5 ГПа. Рабочая площадка наковален имела диаметр 1.2 и 0.6 мм для сапфировых и алмазных наковален, а диаметр рабочего отверстия гasketки из бериллиевой бронзы составлял 450 и 250 мкм соответственно. Для уменьшения растворения кристаллов в качестве среды, передающей давление, использовалась смесь 1 : 1 глицерин—этанол, обладающая гидростатическими свойствами примерно до 5 ГПа. Нагружение образцов проводилось при комнатной температуре с последующим медленным охлаждением до 4.2 К и сопровождалось некоторым изменением давления и уширением спектральных линий. Давление измерялось по сдвигу R_1 -линии люминесценции кристалла рубина при комнатной и гелиевой температурах [11, 12]. Спектральные измерения проводились по оптической схеме, позволявшей получить увеличенное промежуточное изображение кристалла, из которого с помощью скрещенной щели выделялась

центральная часть размером 100×100 мкм. Разрешение прибора составляло примерно 4 см^{-1} , точность определения абсолютного положения плоскости — 2 см^{-1} , точность определения давления примерно 0.05 ГПа . Погрешность измерения оптической плотности с учетом деполяризации света наковальнями и кристаллом не превышала 10% при максимальном давлении. Исследуемые образцы представляли собой монокристаллические пластины с развитой плоскостью (ab), выращенные сублимацией из химически чистого вещества. Качество кристаллов контролировалось по интерференционной окраске с помощью поляризационного микроскопа: для измерений отбирались кристаллы с однородной толщиной от 5 до 10 мкм.

2. Экспериментальные результаты

На рис. 1 приведены спектры оптической плотности кристалла нафталина в области нижайшего синглетного экситонного перехода B_{3u} при 4.2 К и различных давлениях. Сплошная линия соответствует поляризации $\perp \mathbf{b}$, пунктир — поляризации $\parallel \mathbf{b}$. Верхний спектр отвечает нормальному давлению и в поляризации $\perp \mathbf{b}$ содержит узкую полосу A -экситона с частотой $\Omega_A = 31\,475 \text{ см}^{-1}$ и широкую полосу B -экситона с частотой $\Omega_B = 31\,626 \text{ см}^{-1}$, образующие давидовский дублет. На красном краю спектра расположена полоса поглощения примеси β -метилнафталина с частотой $\Omega_{00} = 31\,065 \text{ см}^{-1}$. В поляризации $\parallel \mathbf{b}$ полоса A -экситона отсутствует, полоса B -экситона примерно в 30 раз сильнее и вблизи ее максимума наблюдается полное поглощение на толщинах более 1 мкм [13], а полоса примеси примерно в 5 раз сильнее. Наличие полосы B -экситона в поляризации $\perp \mathbf{b}$ обусловлено ее частичной деполяризацией, составляющей примерно 3% даже в случае кристаллов высокого совершенства. На фиолетовом краю спектра вблизи полосы B -экситона расположена область сильного поглощения, соответствующая электронно-колебательному переходу с участием неполносимметричного внутримолекулярного колебания $\nu = 433 \text{ см}^{-1}$.

С увеличением давления наблюдаются характерные изменения интенсивности и сдвиг полос спектра. Особенно сильно изменяется полоса A -экситона, интенсивность которой падает вплоть до нуля — в спектре при давлении $P = 2.0 \text{ ГПа}$ полоса отсутствует (ее предполагаемое положение показано на рис. 1 стрелкой). При дальнейшем увеличении давления она вновь появляется в спектре и ее интенсивность растет. Интенсивность полосы B -экситона непрерывно растет с увеличением давления, а у примесной полосы она остается практически неизменной. Изменение интенсивности экситонных полос обсуждалось нами ранее [14] в рамках гипотезы Мак-Клюра об индуцированном кристаллическим полем смешивании экситонных состояний B_{3u} и B_{2u} [13]. Целью настоящей работы является детальное исследование сдвига экситонных полос при всестороннем сжатии кристалла. Как видно из рис. 1, все полосы сдвигаются в красную сторону спектра: темпы сдвига полос различны и составляют примерно 190 , 160 и $110 \text{ см}^{-1}/\text{ГПа}$ для A -экситона, примеси и B -экситона соответственно. Давидовское расщепление при этом монотонно растет от начального значения 151 см^{-1} со скоростью примерно $80 \text{ ГПа}/\text{см}^{-1}$ и достигает величины 450 см^{-1} при давлении 3.7 ГПа . При дальнейшем увеличении давления полоса B -экситона столь сильно перекрывается с расположенной выше вибронной полосой, что невозможно точно определить ее положение. В поляризации $\parallel \mathbf{b}$ такое перекрывание наступает еще раньше при более низком давлении, что связано с большей интенсивностью поглощения в этой поляризации. Следует отметить, что все изменения спектров с давлением обратимы: при сбросе давления все детали исходного спектра восстанавливаются, а повторное нагружение повторяет результаты предыдущего.

На рис. 2 изображена зависимость положения полос кристалла нафталина от давления, определенная по нескольким сериям измерений спектров поглощения для разных образцов. На ней изображены положения

полос B - (1) и A -экситонов (2) и положение полосы β -метилнафталина (3). Видно, что сдвиг полос в исследуемом диапазоне давлений не проявляет

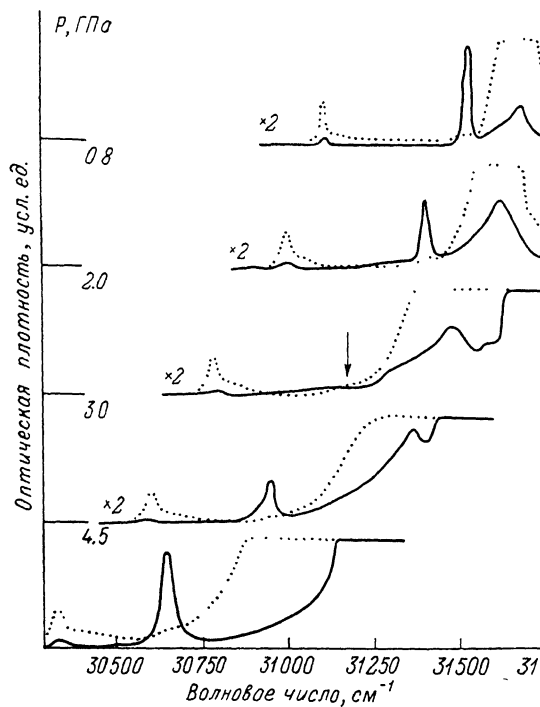


Рис. 1.

тенденции к насыщению и достигает максимального значения примерно 1000 см^{-1} при давлении 5.0 ГПа. Эта величина значительно превышает

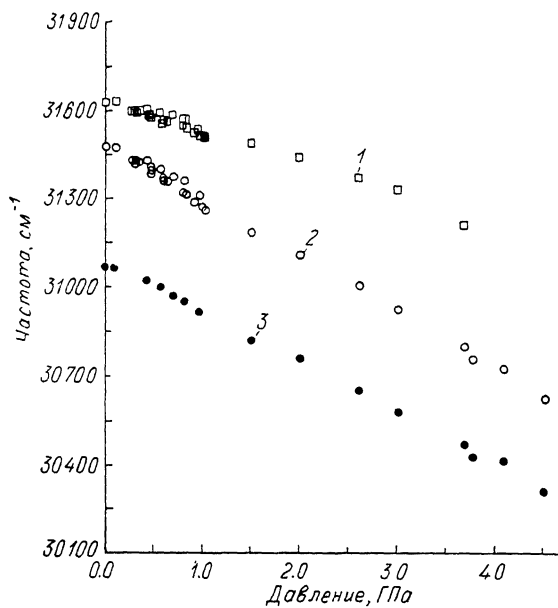


Рис. 2.

сдвиг пар—кристалл для нафталина и его дейтеропроизводных, составляющий при нормальном давлении примерно 470 см^{-1} [15]. Для примеси β -метилнафталина в нафталине этот сдвиг составляет примерно 500 см^{-1}

[16]. Следует отметить, что разброс данных по положению полос для близких значений давления в различных сериях измерений несколько превышает абсолютную погрешность измерений и на наш взгляд обусловлен тем, что при низкотемпературных измерениях в условиях затвердевания передающей давление среды нарушается ее гидростатичность, что может вносить дополнительную погрешность в определение давления. Оценка сверху величины этой погрешности дает значение примерно 0.15 ГПа.

Экспериментальные результаты для кристалла дейтеронафталина получены для нескольких серий измерений спектров при 4.2 К и давлении до 2.0 ГПа. Влияние давления на спектры в этом случае аналогично кристаллу нафталина — наблюдаются значительное изменение интенсивности и сдвиг экситонных полос. Отличие состоит в том, что полоса *A*-экситона исчезает из спектра при несколько меньшем давлении [17]; что же касается сдвига полос, то результаты по темпу сдвига полос *A*- и *B*-экситонов совпадают в пределах погрешности измерений, а полоса примеси β -метилнафталина в кристалле дейтеронафталина отсутствует. Экспериментальные данные по сдвигу экситонных полос в кристаллах нафталина и дейтеронафталина при всестороннем сжатии содержат важную информацию о межмолекулярном взаимодействии, и их анализ будет проводиться в следующей части работы.

3. Обсуждение результатов

Целью этой части работы являются определение зависимости величин *D* и L_{12} от межмолекулярных расстояний и их анализ в рамках различных моделей взаимодействия. Экспериментальные результаты по сдвигу экситонных полос под давлением и существующие данные по измерению объемной сжимаемости кристалла нафталина позволяют получить их в определенном приближении. Дело в том, что из данных по объемной сжимаемости можно точно определить изменение плотности кристалла с ростом давления, однако возможная анизотропия линейной сжимаемости для различных кристаллографических направлений не позволяет утверждать, что все межмолекулярные расстояния изменяются одинаковым образом. Об этом свидетельствуют результаты работы [18], в которой определялась кристаллическая структура до давления 0.5 ГПа и была обнаружена анизотропия линейной сжимаемости для [100] [010] и [001] кристаллографических направлений. Поэтому мы будем искать зависимость величин *D* и L_{12} от относительного изменения плотности P_p/P_0 . Величина L_{12} определяется непосредственно из экспериментального значения давидовского расщепления экситонных полос *S*, равного $2L_{12}$. Сдвиг молекулярного терма *D* можно определить, если принять во внимание, что величина L_{11} , составляющая, по оценкам, примерно 10 см^{-1} при нормальном давлении, значительно меньше сдвига пар—кристалл, равного при нормальном давлении примерно 470 см^{-1} . Это означает, что $\Delta E_{\text{кр}} - \Delta E_{\text{мол}} = D + L_{11} \approx D$ и в этом приближении величину *D* можно определить из положения молекулярного терма, считая, что он расположен посередине между компонентами давидовского дублета. Для определения относительного изменения плотности кристалла P_p/P_0 с ростом давления были использованы данные ра-

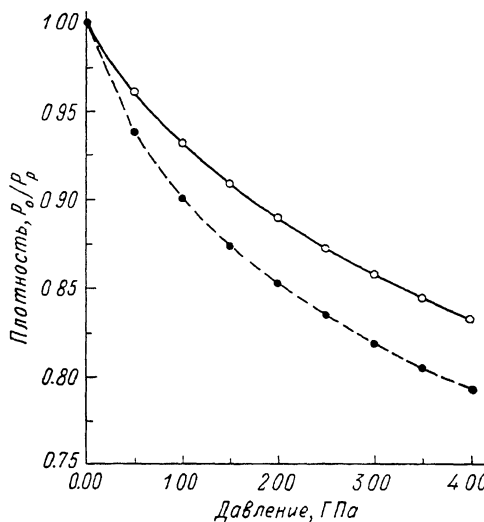


Рис. 3.

боты Вайдья и Кеннеди [19] по измерению объемной сжимаемости кристалла нафталина до давления 4.5 ГПа. Эти данные хорошо согласуются с полученными ранее результатами Бриджмена [20] — максимальное различие при давлении 4.0 ГПа не превышает 1%. Зависимость относительной плотности P_p/P_0 от давления, полученная в [19] для кристалла нафталина при 300 К приведена на рис. 3. На нем экспериментальные данные отмечены черными кружочками, а соединяющая их штриховая линия проведена при условии наилучшей аппроксимации полиномами пятой степени. Следует отметить, однако, что прямое использование этих данных затруднено тем обстоятельством, что наши измерения проводились при темпера-

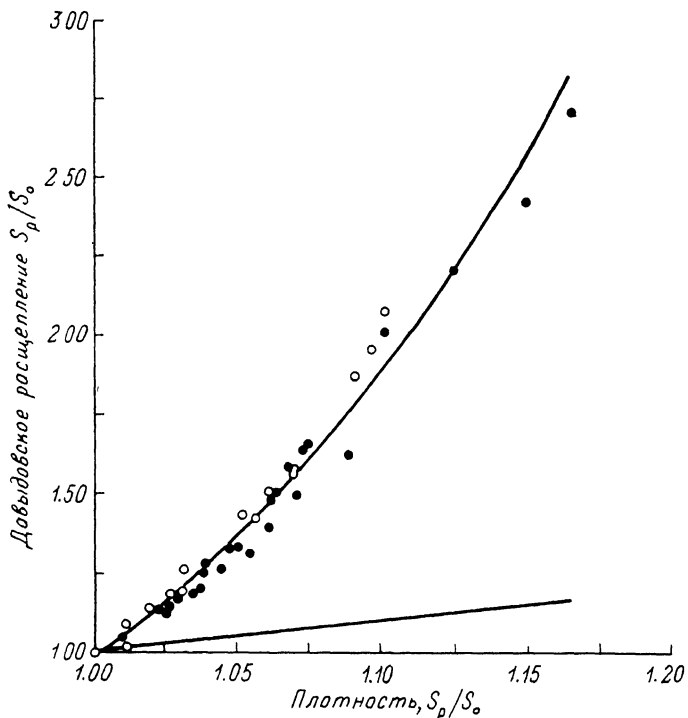


Рис. 4.

туре 4.2 К. Понижение температуры от 300 до 4.2 К приводит к определенному сжатию кристалла, увеличению его плотности и сопровождается уменьшением сжимаемости. Если воспользоваться данными расчета температурной зависимости молярного объема кристалла нафталина [21], то можно определить, что охлаждение до 4.2 К эквивалентно сжатию примерно до 0.5 ГПа при 300 К. Это обстоятельство, на наш взгляд, позволяет использовать данные Вайдья и Кеннеди при обработке низкотемпературных данных: для этого их необходимо сдвинуть на 0.5 ГПа в сторону уменьшения давления. При этом значению объема при 4.2 К и нормальном давлении будет соответствовать значение при давлении 0.5 ГПа и 300 К, и таким же образом сдвигаются другие значения. Эти данные обозначены на рис. 3 светлыми кружочками и соединены сплошной линией. Они использовались непосредственно для вычисления относительной плотности P_p/P_0 при обработке экспериментальных результатов. Оценить погрешность такого приближения довольно трудно, однако нет сомнений в том, что она несравнимо меньше погрешности расчетов P_p/P_0 в линейном приближении с использованием не зависящего от давления коэффициента изотермической объемной сжимаемости.

На рис. 4 приведена зависимость величины давидовского расщепления экситонных полос S_p/S_0 от относительного изменения плотности кристалла P_p/P_0 , вычисленная из экспериментальных данных таким способом.

Светлые кружочки отвечают кристаллу дейтеронафталина, темные — кристаллу нафталина. Экспериментальные результаты для обоих веществ укладываются в единую зависимость и хорошо аппроксимируются степенной функцией — ей соответствует сплошная линия, проведенная в условиях наилучшего описания экспериментальных данных. Эта зависимость описывается формулой $S_p/S_0 = (P_p/P_0)^{6.9 \pm 1.2}$. Прямая линия на рисунке отвечает линейной зависимости $S_p/S_0 \sim P_p/P_0$, ожидаемой в дипольном приближении при учете главного члена в мультипольном разложении.

На рис. 5 приведены зависимости сдвига молекулярного термина D_p/D_0 от относительного изменения плотности P_p/P_0 для кристаллов дейтеронафталина (1) и нафталина (2); 3 — сдвиг примесной полосы β -метилнафталина. Все экспериментальные результаты укладываются в единую зависимость и хорошо аппроксимируются степенной функцией (сплошная линия,

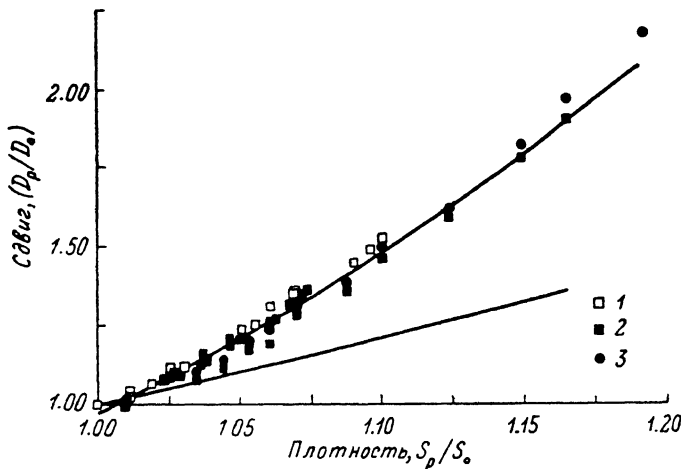


Рис. 5.

проведенная при условии наилучшего описания экспериментальных данных). Эта зависимость описывается формулой $D_p/D_0 = (P_p/P_0)^{4.4 \pm 0.8}$. Нижняя кривая на рис. 5 — квадратичная зависимость $D_p/D_0 = (P_p/P_0)^2$, ожидаемая в приближении ван-дер-ваальсовского взаимодействия при учете главных членов мультипольного разложения. Следует отметить, что полученные результаты значительно отличаются от наших первых результатов [7] по исследованию межмолекулярного резонансного взаимодействия в кристалле нафталина. Отличие, на наш взгляд, объясняется следующими причинами. В работе [7] для определения давления при низких температурах использовалась низкотемпературная калибровочная константа для рубиновой шкалы давления [22], величина которой примерно на четверть меньше общепринятого значения. Как показали Ноак и Хольцапфель [12], калибровочная константа для рубиновой шкалы давлений не зависит от температуры и использование данных [22] приводит к завышению давления. Другая причина состоит в том, что в [7] для определения относительного изменения объема V_0/V_p использовались линейное приближение и постоянное значение изотермической объемной сжимаемости, соответствующее давлению примерно 0.5 ГПа. Величина изотермической объемной сжимаемости $\beta_T = -(dV/dP)/V$ определяется из наклона касательной к кривой $V(P)$, и, как видно из рис. 3, она сильно уменьшается ростом давления. Поэтому такая процедура приводит к завышению величины относительного изменения объема и искажению истинной зависимости.

Таким образом, полученная экспериментальная зависимость давидовского расщепления S_p/S_0 и сдвига полос D_p/D_0 хорошо описывается степенной функцией относительного изменения плотности P_p/P_0 с очень боль-

шим показателем степени и значительно превышающим ожидаемый в дипольном приближении. Это означает, что межмолекулярное взаимодействие является короткодействующим и основной вклад в него вносит взаимодействие ближайших соседей. Согласно теории молекулярных экситонов [3], сдвиг пар—кристалл в кристаллах с двумя молекулами в элементарной ячейке определяется формулой

$$D = \sum'_{n, \alpha} \left\{ |\varphi_{m\beta}^f|^2 V_{n\alpha m\beta} |\varphi_{n\alpha}^0|^2 d\tau - \int |\varphi_{m\beta}^0|^2 V_{n\alpha m\beta} |\varphi_{n\alpha}^0|^2 d\tau \right\}. \quad (2)$$

Здесь суммирование проводится по всем молекулам обоих типов α и β ; $V_{n\alpha m\beta}$ — оператор энергии взаимодействия молекул $n\alpha$ и $m\beta$; $\varphi_{m\beta}$ — волновая функция молекулы $m\beta$; индексы «f» и «0» соответствуют возбужденному и основному состоянию молекулы. Давыдовское расщепление $S = 2L_{\alpha\beta}(k=0) = 2 \sum'_{n} M'_{0\alpha n\beta}$, где матричные элементы $M'_{0\alpha n\beta}$ определяют вероятность передачи возбуждения между трансляционно-неэквивалентными молекулами 0α и $n\beta$, а суммирование проводится по всем парам таких молекул. Величины $M'_{0\alpha n\beta}$ определяются формулой

$$M'_{0\alpha n\beta} = \int \varphi_{n\beta}^{*0} \varphi_{0\alpha}^{*f} V_{0\alpha n\beta} \varphi_{0\alpha}^0 \varphi_{n\beta}^f d\tau. \quad (3)$$

Оператор энергии взаимодействия двух молекул $V_{n\alpha m\beta}$ включает в себя кулоновскую и обменную энергии взаимодействия. В большинстве расчетов взаимодействие считается чисто кулоновским, поскольку предполагается, что волновые функции электронов соседних молекул перекрываются слабо и обменное взаимодействие мало. В наиболее простом случае кулоновское взаимодействие рассчитывается в дипольном приближении, при этом учитывается только вклад главных членов в мультипольном разложении. Учет высших членов в мультипольном разложении дает поправки, величина которых мала по сравнению с вкладом главных членов в случае сильных и средних переходов, а в случае слабых переходов эти вклады сравнимы. При этом вклад диполь-дипольного взаимодействия является дальнедействующим и убывает пропорционально R^{-3} , а следующие ненулевые для молекул симметрии D_{2h} диполь-октупольный и октуполь-октупольный вклады убывают пропорционально R^{-5} и R^{-7} . Следует отметить, что дипольное приближение является самым простым и неточным: оно дает неудовлетворительные результаты в случае слабых переходов даже при учете высших членов в мультипольном разложении. Более точные приближения для кулоновского взаимодействия рассмотрены в работе Филпота и Шлоссера [23]. Эти расчеты основываются на реальном распределении зарядов в молекуле, в частности учитывают конфигурацию атомных орбиталей. В этом случае обычно разделяются дипольная и недипольная части взаимодействия. Расчет недипольной части, проведенный Филпотом для сильных переходов в кристаллах нафталина и антрацена, показал, что она составляет примерно 15 % от полного взаимодействия. Недипольное взаимодействие быстро спадает с увеличением расстояний — энергия парного взаимодействия уменьшается на один-два порядка при переходе от ближайшей молекулы к следующей.

Обменное взаимодействие, обусловленное перекрыванием электронных волновых функций соседних молекул, имеет исключительно короткодействующий характер и дает соответствующий вклад в парные резонансные интегралы. Его рассмотрение проводилось в работе Уэлмсли и Гисби [8], где они основывались в своем расчете на приближенном методе, предложенном Чандрой и Лимом [24] для вычисления энергии эксимерных состояний. Результаты [8] по вычислению зависимости давидовского расщепления от межмолекулярных расстояний близки к экспериментальным, однако полученные значения энергии парного взаимодействия значительно отличаются от измеренных Хонгом и Копельманом [9] из спектров примесных парных центров. Вклад электронного обменного взаимодействия быстро

растет с уменьшением межмолекулярных расстояний: согласно [8], его величина в кристалле нафталина возрастает от 30 % при нормальном давлении до 50 % при давлении 1.5 ГПа, и можно предположить, что он будет доминировать при высоких давлениях.

Таким образом, короткодействующий характер сил межмолекулярного резонансного взаимодействия может быть обусловлен недипольной частью кулоновского взаимодействия или электронным обменным взаимодействием. Результаты по исследованию давидовского расщепления экситонных полос при всестороннем сжатии в кристаллах антрацена и нафталина показывают, что независимо от силы осциллятора экситонного перехода межмолекулярное резонансное взаимодействие является короткодействующим. Можно предположить, что межмолекулярное взаимодействие не является чисто кулоновским или обменным: оно включает в себя и то, и другое. Имеющиеся экспериментальные данные ставят под сомнение предположение о слабом перекрывании электронных волновых функций и пренебрежение обменным взаимодействием в расчетах энергии парного взаимодействия. Во всяком случае нам представляются интересными экспериментальные исследования в этом направлении. Такие работы создают предпосылки для более точных расчетов, и хотелось бы надеяться, что они приведут к этому.

Список литературы

- [1] Prichotko A. F. // *J. Phys.* 1944. V. 8. N 5. P. 257—275.
- [2] Давыдов А. С. // *ЖЭТФ*. 1948. Т. 18. № 2. С. 210—218.
- [3] Давыдов А. С. Теория молекулярных экситонов. М., 1968.
- [4] Ohigashi H., Shirotani I., Inokuchi H., Minomura S. // *J. Chem. Phys.* 1965. V. 43. N 1. P. 314—320.
- [5] Shirotani I., Kamura Y., Inokuchi H. // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1974. V. 28. N 2. P. 345—352.
- [6] Sonnenschein R., Syassen K., Otto A. // *J. Chem. Phys.* 1981. V. 74. N 8. P. 4315—4319.
- [7] Мелегов К. П., Шанов М. Ф. // *ФТТ*. 1985. Т. 27. № 1. С. 106—111.
- [8] Gisby J. A., Walmsley S. H. // *Chem. Phys. Lett.* 1987. V. 135. N 3. P. 275—278.
- [9] Hong H. K., Kopelman R. // *J. Chem. Phys.* 1971. V. 55. N 2. P. 724—745.
- [10] Мелегов К. П. // *ПТЭ*. 1990. № 1. С. 215—217.
- [11] Piermarini G. J., Block S., Barnett J. D., Forman R. A. // *J. Appl. Phys.* 1975. V. 46. N 6. P. 2774—2790.
- [12] Noack R. A., Holzapfel W. B. // *High Pressure Science and Technology (Proc. Sixth AIRAPT Intern. High-Pressure Conf. Boulder, CO, 1977 / Ed. K. D. Timmerhaus and M. S. Barber)*. N. Y., 1979. V. 1. P. 748—753.
- [13] McClure D. S., Schnepf O. // *J. Chem. Phys.* 1955. V. 23. N 9. P. 1575—1585.
- [14] Мелегов К. П. // *ФТТ*. 1990. Т. 32. № 10. С. 2979—2984.
- [15] Sheka E. F., Terenetskaya I. P. // *Chem. Phys.* 1975. V. 8. N 1. P. 99—111.
- [16] Marjit H. W., Banerjee S. B. // *Indian J. Pure and Appl. Phys.* 1973. V. 11. N 1. P. 37—41.
- [17] Мелегов К. П. // *ФТТ*. 1989. Т. 31. N 6. С. 25—30.
- [18] Jordan J. F., Axman A., Egger H., Kalus J. // *Phys. St. Sol. (a)*. 1982. V. 74. N 2. P. 457—462.
- [19] Vaidya S. N., Kennedy G. C. // *J. Chem. Phys.* 1971. V. 55. N 4. P. 987—994.
- [20] Бриджмен П. В. Новейшие работы в области высоких давлений. М., 1948.
- [21] Ryjnkov A. P., Kozhin V. M. // *Kristallogr.* 1968. V. 13. N 6. P. 1028—1039.
- [22] Шанов М. Ф., Субботин С. И. // *ПТЭ*. 1977. № 4. С. 246—248.
- [23] Schlosser D. W., Philpott R. // *J. Chem. Phys.* 1982. V. 2. N 4. P. 1969—1983.
- [24] Chandra A. K., Lim E. C. // *J. Chem. Phys.* 1968. V. 48. N 12. P. 2589—2598.

Институт физики твердого тела
АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
20 июля 1990 г.