

УДК 538.913

© 1992

НЕЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРНЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛОВ $KZnF_3$ и K_2ZnF_4

В. Г. Мазуренко, А. Е. Никифоров, С. Ю. Шашкин

Неэмпирические межионные потенциалы использованы для расчета структурных (постоянной решетки, параметров, характеризующих положение ионов в элементарной ячейке, упругих и диэлектрических постоянных) и динамических (дисперсионных кривых колебаний) характеристик кристаллов $KZnF_3$ и K_2ZnF_4 , состоящих из одинаковых ионов и имеющих различные кристаллические структуры. Получены аномальные зависимости от давления частот вращательных мод, которые нестабильны в решетках перовскита и двумерного перовскита.

В настоящее время достигнут определенный прогресс в описании макроскопических свойств и динамики фононов идеальных и дефектных кристаллов с использованием потенциалов межионных взаимодействий [1-6]. Ионные кристаллы, для которых многочастичные вклады в энергию решетки незначительны, удается достаточно полно описать в рамках приближения парных потенциалов центрального типа, т. е. рассматривая потенциальную энергию $E(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ совокупности N ионов в виде суммы вкладов от каждой пары частиц

$$E(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}. \quad (1)$$

Каждый член в сумме зависит от расстояния между ионами и содержит дальнедействующее кулоновское взаимодействие и вклад близкодействия, описывающий эффекты перекрытия и деформации электронных оболочек взаимодействующих ионов (см. формулу (2)).

Межионные потенциалы могут быть определены как с использованием эмпирических данных, так и путем квантовомеханического расчета энергии взаимодействия ионов при различных расстояниях между их ядрами. Неэмпирический расчет позволяет использовать рассчитанные потенциалы для материалов различных структурных типов, моделировать свойства материалов под действием сильных давлений, причем любые расхождения между величинами, полученными в неэмпирическом расчете и измеренными экспериментально, являются следствием хорошо осознаваемых приближений. Кроме того, ценность неэмпирического подхода заключается в обосновании применяемых и в стимулировании новых полуэмпирических моделей.

В последнее время кристаллы со структурой перовскита и слоистые перовскитоподобные кристаллы интенсивно исследуются, что связано с интересными свойствами этих материалов (структурные фазовые переходы, высокотемпературная сверхпроводимость и т. д.).

В работе [6] получены экспериментальные дисперсионные кривые кристаллов $KZnF_3$ и $KMnF_3$ и проведен их анализ с использованием подгоночных сило-

вых постоянных, число которых во всех вариантах расчета достаточно велико (например, 4 варьируемых параметров в модели SM1). Кристалл $KZnF_3$ не испытывает структурного фазового перехода, но в [6] обнаружена аномальная температурная зависимость колебательных мод, с размягчением которых связаны структурные фазовые переходы во многих перовскитных кристаллах.

В работе [2] проведено сравнительное исследование кристаллов $KZnF_3$ и $KMnF_3$ в рамках модели полуэмпирических парных потенциалов. Параметры потенциалов $X-F$ ($X=Mn, Zn$), заряды остовов и оболочек всех ионов найдены путем подгонки результатов расчета под экспериментальные дисперсионные кривые фононов и равновесные параметры кристаллической решетки, а в качестве потенциалов $K-F$ и $F-F$ взяты полуэмпирические потенциалы, описывающие свойства щелочно-галлоидных соединений. Проведено моделирование на ЭВМ температурной и барической зависимости мягких мод.

Значительно меньше исследован кристалл K_2ZnF_4 — представитель слоистых перовскитоподобных материалов с чередованием слоев ZnF_2 , KF . Построение удачной динамической модели для этих структур представляет несомненный интерес в связи с исследованием явления высокотемпературной сверхпроводимости в материалах типа La_2CuO_4 , имеющих такую же структуру в высокосимметричной фазе. Кристалл K_2ZnF_4 представляет собой удобный модельный объект для исследования динамики идеальных и дефектных слоистых перовскитов. В работе [7] получены экспериментальные дисперсионные кривые этого материала методом неупругого рассеяния нейтронов для двух направлений в зоне Бриллюэна, а в работе [8] проведен анализ дисперсионных кривых в рамках оболочечной модели с вариацией силовых постоянных и зарядов.

В данной работе ранее рассчитанные нами неэмпирические межионные потенциалы [4, 5] использованы для моделирования физических свойств соединений $KZnF_3$ и K_2ZnF_4 . Возможность описать физические свойства таких различных материалов одним набором межатомных потенциалов представляет собой хороший тест для проверки адекватности модельного выражения для энергии решетки (1) и метода получения неэмпирических потенциалов.

В разделе 1 обсуждается метод получения неэмпирических межионных потенциалов и приведены форма и параметры используемых в дальнейшем потенциалов. В разделе 2 представлены результаты расчета структурных параметров кристаллов при нулевой температуре, а также их изменения при гидростатическом давлении. Рассчитаны низкотемпературные упругие и диэлектрические постоянные этих материалов. В разделе 3 приведены рассчитанные дисперсионные кривые кристаллов в симметричных направлениях зоны Бриллюэна, а также барические зависимости частот мягких мод для рассматриваемых кристаллов при $T=0$.

1. Неэмпирические межионные потенциалы

Процедура неэмпирического определения парных потенциалов состоит из следующих этапов: а) самосогласованный квантомеханический расчет энергии кластера, содержащего взаимодействующие ионы, для различных конфигураций расположения ядер (в простейшем случае кластер содержит лишь два иона); б) аппроксимация рассчитанных численно потенциалов (энергий) взаимодействия аналитическими выражениями, наилучшим образом воспроизводящими результаты расчета для актуальных межионных расстояний.

При получении потенциалов $F-F$ и $K-F$ были рассчитаны методом конфигурационного взаимодействия энергии линейных кластеров $[F_2]^{2-}$ и $[KF_2]^-$. Результаты численных расчетов аппроксимировались типичным для оболочечной модели кристалла выражением для парных потенциалов

$$V_{ij} = V_{ij}(0) + \frac{X_i X_j}{r} + \frac{Y_i X_j}{|r - l_i|} + \frac{Y_i X_j}{|r + l_j|} + \frac{Y_i Y_j}{|r - l_i + l_j|} + f_{ij}(r) + g_{ij}(|r - l_i + l_j|) + \frac{1}{2}(K_i l_i^2 + K_j l_j^2), \quad (2)$$

где вклад

$$f_{ij}(r) = -A_{ij} \exp(-B_{ij}r)/r \quad (3)$$

описывает близкодействующее электростатическое экранирование и

$$g_{ij}(R) = C_{ij} \exp(-D_{ij}R) - C_6/R^6 \quad (4)$$

описывает близкодействующее отталкивание и дисперсионное (ван-дер-ваальсово) взаимодействие. В (2) X_i, Y_i — заряды остова и оболочки i соответственно, l_i — сдвиг оболочки i по отношению к остову i ; K_i — упругая постоянная оболочечной модели; $r = |r_{ij}|$ — расстояние между остовами. Потенциалы К—F, F—F были апробированы при расчете свойств кристалла KF [4] и дали хорошее описание структурных, упругих и диэлектрических свойств, а также фононных спектров.

Таблица 1
Параметры парных потенциалов (а. е.)

Ионы	A	B	C	D	C_6
F ⁻ —F ⁻	36.4562	1.37783	157.083	1.89265	69.5469
K ⁺ —F ⁻	95.6881	1.66925	274.984	2.01762	0.0
Zn ²⁺ —F ⁻	18.8136	1.07338	64.509	1.70780	0.0

$$X_F = 5, X_K = 7, Y_F = Y_K = -6, K_F = 4.1799, K_K = 6.67.$$

Поскольку электронное строение ионов Zn²⁺ и Cu²⁺ близко, мы используем для аппроксимации взаимодействия Zn²⁺—F⁻ потенциал Cu²⁺—F⁻, найденный в [5]. В табл. 1 приведены параметры используемых парных потенциалов, а также заряды остовов и оболочек для рассматриваемых ионов. Детали расчета потенциалов приведены в [5]. Отметим, что к числу исходных приближений, в рамках которых были определены парные потенциалы, следует отнести пренебрежение близкодействием ионов K⁺—K⁺, Zn²⁺—Zn²⁺ и пренебрежение поляризуемостью ионов Zn²⁺.

2. Статические свойства кристаллов KZnF₃ и K₂ZnF₄

Расчеты структурных параметров, упругих и диэлектрических постоянных кристаллов выполнены с использованием комплекса FORTRAN-программ IC SMS (Ionic Crystal Shell Model Simulation). Параметры элементарной ячейки и координаты позиций атомов находятся (для фиксированной пространственной группы симметрии кристалла) путем численной минимизации энергии (1) с добавлением при необходимости вклада PV (P — давление, V — объем кристалла), связанного с гидростатическим давлением. Тензоры диэлектрических и упругих постоянных выражаются через элементы матрицы вторых производных энергии кристалла по смещениям ионов и компонентам однородной деформации. Соответствующие соотношения для модели жестких ионов приведены в [1] (глава 1). Мы обобщили эти результаты на случай поляризуемых ионов (оболочечная модель) и, кроме того, при выводе конечных формул исполь-

Таблица 2
Кристаллическая структура $KZnF_3$ и K_2ZnF_4

Кристалл	Атом	Позиции	Координаты атомов
$KZnF_3$ (O_h)	Zn	1a	(000)
	F	3d	$(\frac{1}{2}00)$, $(0\frac{1}{2}0)$, $(00\frac{1}{2})$
	K	1b	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
K_2ZnF_4 (D_{4h}^{17})	Zn	2a	(000), $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	F (1)	4c	(000), $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ + $(\frac{1}{2}00)$, $(0\frac{1}{2}0)$
	F (2), K	4e	(000), $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ + $(0, 0, \pm Z)$

зовали матрицу вторых производных в базисе симметризованных атомных смещений и компонент деформации, преобразующихся по неприводимым представлениям точечной группы кристалла. Использование симметризованного базиса резко сокращает затраты компьютерного времени и ресурсов памяти для реализованного в программах ICSMS численного расчета ненулевых блоков матрицы вторых производных энергии. Очевидно, что собственные значения этой матрицы непосредственно связаны с частотами фундаментальных колебаний кристалла, а собственные векторы описывают атомные смещения, соответствующие фундаментальным колебаниям. Входная информация для программ ICSMS содержит параметры парных потенциалов, описание кристаллической структуры и матрицу преобразования от декартовых к симметризованным смещениям ионов; рассчитывается же довольно широкий набор физических свойств: параметры структуры, тензоры упругих и диэлектрических (низко- и высокочастотных) постоянных, фундаментальный колебательный спектр. Комплекс программ ICSMS (написанный С. Ю. Шашкиным) ориентирован на работу в системе виртуальных машин ЕС ЭВМ.

Кристаллические структуры соединений $KZnF_3$ и K_2ZnF_4 значительно отличаются. Кристалл $KZnF_3$ обладает идеальной структурой перовскита [9], а кристалл K_2ZnF_4 имеет тетрагональную структуру типа K_2NiF_4 с простран-

Таблица 3
Величины структурных параметров $KZnF_3$ и K_2ZnF_4
(постоянные решетки a , c , Å)

	$KZnF_3$	K_2ZnF_4			
	a	a	c	Z_F	Z_K
Расчет	4.064	4.052	13.471	0.1502	0.3529
Эксперимент [9, 10]	4.057	4.058	13.109	0.1546	0.3538

Таблица 4

Упругие постоянные (ГПа), диэлектрические проницаемости и частоты поперечных оптических колебаний (ТГц) в центре зоны Бриллюэна для кристалла $KZnF_3$. Величины в скобках рассчитаны с учетом поляризуемости Zn^{2+} ($Y_{Zn} = -6.0$, $K_{Zn} = 21.8$)

	c_{11}	c_{12}	c_{44}	ϵ^{00}	ϵ^0	γ_1	γ_2	γ_3
Расчет	189.4	55.6	55.6	2.18 (2.32)	6.60 (8.30)	4.40 (4.40)	6.34 (6.16)	14.7 (11.8)
Эксперимент	134.5	52.7 [11]	38.1	2.34	8.85 [12]	4.0	6.0 [8]	12.0

ственной группой симметрии D_{3h}^{17} [10] (табл. 2). Найденные нами величины структурных параметров приведены в табл. 3 (при оптимизации энергии кристаллов учитывалось ближкодействие ближайших соседей $Zn-F$ и первых и вторых соседей $F-F$, $F-K$). Для K_2ZnF_4 симметрия кристалла допускает возникновение статических дипольных моментов на ионах фтора и калия в позиции $4e$. В рамках используемой микроскопической модели решетки эти дипольные моменты связаны со сдвигом вдоль оси c оболочек соответствующих ионов относительно их остовов; оптимальные величины сдвигов невелики (0.015 и 0.006 Å для F и K соответственно), причем сдвиг оболочки фтора происходит в направлении ближайшего к нему иона Zn, а сдвиг оболочки калия — в направлении ближайшего фтора.

Расчитанные упругие постоянные (табл. 4, 5) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Для кубического кристалла $KZnF_3$ в нашей модели выполняется соотношение Коши $c_{12} = c_{44}$, так как учитываются лишь парные взаимодействия центрального типа и однородная деформация не сопровождается относительным сдвигом подрешеток. В кристалле K_2ZnF_4 a_{1g} - и e_g -компоненты деформации взаимодействуют со смещениями подрешеток калия и фтора такой же симметрии; поэтому учет a_{1g} -смещений подрешеток существенно влияет на величины c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} , а учет e_g -смещений — на величину c_{44} (табл. 5). Учет взаимодействия однородной деформации и смещений подрешеток приводит, во-первых, к заметному нарушению соотношений Коши, которые для тетрагонального кристалла сводятся к $c_{12} = c_{66}$, $c_{13} = c_{44}$. Во-вторых, только при учете этого взаимодействия обеспечивается качественно верное соотношение величин упругих постоянных: $c_{11} > c_{33}$. Действительно, имея в виду слоистый характер структуры K_2ZnF_4 , следует ожидать, что величина «внутрислоевой» упругой постоянной c_{11} больше, чем «межслоевой» c_{33} (что и

Таблица 5

Упругие постоянные кристалла K_2ZnF_4 (ГПа): расчет без учета (а) и с учетом (б) взаимодействия однородной деформации со сдвигами подрешеток, эксперимент (в) при 77 К [13]

	c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}	c_{66}
а	133.3	37.8	42.7	150.1	42.7	37.8
б	124.1	28.6	28.9	97.0	17.1	37.8
в	99.7	38.7	65.6	80.6	16.6	27.0

Таблица 6

Диэлектрические проницаемости K_2ZnF_4 :
расчет без учета (а) и с учетом (б)
поляризуемости Zn, эксперимент [14] (в)

	ϵ_{xx}^{00}	ϵ_{zz}^{00}	ϵ_{xx}^0	ϵ_{zz}^0
а	2.01	1.99	7.24	5.22
б	2.09	2.06	8.04	5.88
в	2.30	2.34	9.47	6.81

подтверждается экспериментально); с микроскопической точки зрения это соотношение обеспечивается дополнительной «подстройкой» относительного расположения подрешеток при «включении» однородной деформации.

Диэлектрические проницаемости (табл. 4, 6) также неплохо согласуются с данными эксперимента. Очевидно, что несколько заниженные значения ϵ_{ij}

обусловлены (по крайней мере частично) пренебрежением поляризуемостью ионов Zn^{2+} . Влияние учета поляризуемости Zn^{2+} на результаты расчета физических свойств кристаллов обсуждается кратко в конце статьи.

На рис. 1 представлены рассчитанные зависимости относительного изме-

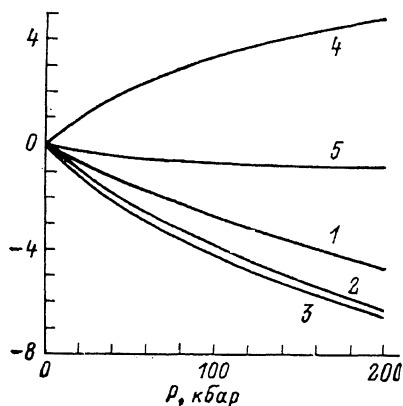


Рис. 1. Относительное изменение (в %) структурных параметров (ось ординат) кристаллов $KZnF_3$ (1) и K_2ZnF_4 (2—5) с ростом гидростатического давления: $(a - a_0)/a_0$ (1, 2), $(c - c_0)/c_0$ (3), $(Z_F - Z_F^0)/Z_F^0$ (4), $(Z_K - Z_K^0)/Z_K^0$ (5).

нения (в процентах) постоянных решетки и структурных параметров Z_F , Z_K , определяющих положение подрешеток фтора и калия в K_2ZnF_4 , от величины гидростатического давления. Для K_2ZnF_4 постоянные решетки изменяются сильнее, чем для $KZnF_3$. При этом в слоистом кристалле постоянная c в направлении, перпендикулярном слоям, сокращается с ростом давления заметно быстрее, чем постоянная a . При нулевом давлении в K_2ZnF_4 фторовые октаэдры, окружающие ионы Zn, несколько сплюснуты вдоль оси c (расчет: $R_1 = a/2 = 2.026 \text{ \AA}$, $R_2 = cZ_F = 2.023 \text{ \AA}$; эксперимент [10]: $R = 2.029 \text{ \AA}$, $R_2 = 2.027 \text{ \AA}$). По результатам нашего расчета гидростатическое давление $P > 4$ кбар изменяет характер искажения фторовых октаэдров; произведение cZ_F уменьшается с давлением существенно медленнее, чем постоянная решетки a , и поэтому фторовые октаэдры становятся вытянутыми вдоль оси c , несмотря на то что постоянная c сокращается быстрее постоянной a .

В работе [13] исследовался спектр ЭПР иона Ni^{2+} в кристалле K_2ZnF_4 в присутствии гидростатического давления. Установлено, что с ростом давления вплоть до 14 кбар параметр начального расщепления D монотонно уменьшается по абсолютной величине, не изменяя своего знака. По нашему мнению, это означает, что величина параметра D в значительной степени определяется взаимодействием примесного иона Ni^{2+} со вторыми (пара ионов калия вдоль

оси c) и более далекими соседями; изменение знака вклада от ближайших фторов при $P > 4$ кбар не изменяет знака параметра D .

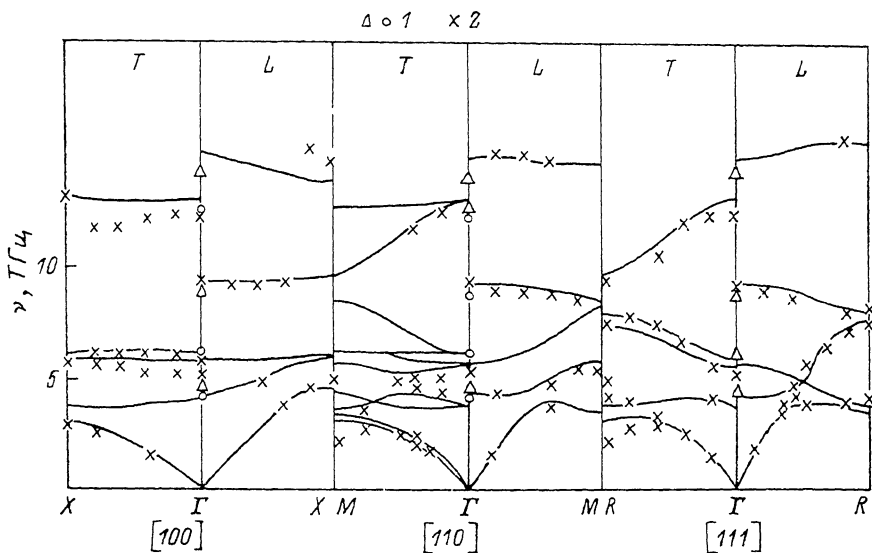


Рис. 2. Дисперсионные кривые для кристалла $KZnF_3$.

Сплошные линии — наш расчет, точки — данные измерений ИК и КР спектров (1) и рассеяния нейтронов [4] (2).

3. Фононные спектры кристаллов $KZnF_3$ и K_2ZnF_4

Расчитанные в рамках оболочечной модели кристалла с параметрами потенциалов из табл. 1 дисперсионные кривые фононов вместе с имеющимися экспериментальными данными представлены на рис. 2—4. Расчеты проводились с использованием программы SHELL (автор В. Г. Мазуренко). Для проведения теоретико-группового анализа и преобразования динамической матрицы к блочно-диагональной форме использовалась программа, опубликованная в [15].

Дисперсионные кривые $KZnF_3$ рассчитаны для направлений [100], [110] и [111] в зоне Бриллюэна; рис. 2 демонстрирует их удовлетворительное согла-

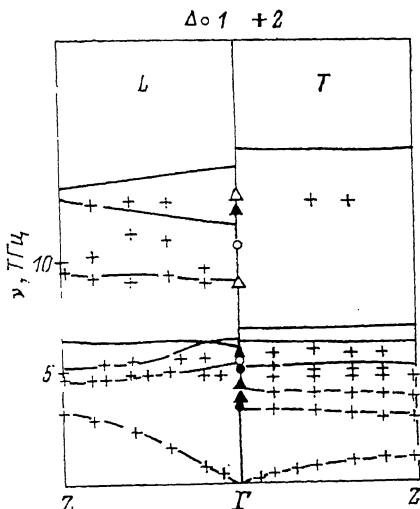


Рис. 3. Дисперсионные кривые для кристалла K_2ZnF_4 в направлении [001].

Сплошные линии — наш расчет, точки — данные измерений ИК и КР спектров (1) и рассеяния нейтронов [9] (2).

сие с экспериментальными данными. Наибольшее расхождение (до 14 %) возникает для высокочастотных оптических ветвей колебаний в направлении [100].

Как отмечалось выше, в ряде кристаллов со структурой перовскита при изменении температуры или давления наблюдаются фазовые переходы, свя-

занные с «размягчением» колебательной моды R'_{25} . Кристалл $KZnF_3$ не испытывает фазового перехода, однако и для него наблюдается аномальная зависимость частоты моды R'_{25} (уменьшение частоты с ростом давления) [16]. Результаты

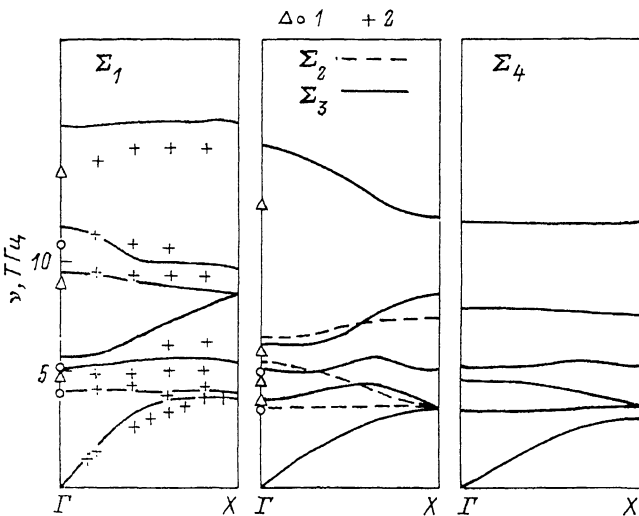


Рис. 4. Дисперсионные кривые для кристалла K_2ZnF_4 в направлении $[110]$.

Линии — наш расчет, точки — данные измерений ИК и КР спектров (1) и рассеяния нейтронов [8] (2).

таты наших расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными (рис. 5).

Дисперсионные кривые K_2ZnF_4 рассчитаны для направлений $[001]$ (рис. 3) и $[110]$ (рис. 4). Наибольшее расхождение с экспериментальными данными (около 10 %) имеет место для высокочастотных оптических ветвей, как и в случае $KZnF_3$. Двумерный характер кристалла проявляется в слабой дисперсии оптических ветвей в направлении $[001]$.

В некоторых кристаллах со структурой K_2NiF_4 наблюдаются структурные фазовые переходы, связанные с «мягким» характером низкочастотной акустической моды в точке X зоны Бриллюэна [8, 17]. Для K_2ZnF_4 структурных фазовых переходов не обнаружено, однако расчеты позволяют выделить

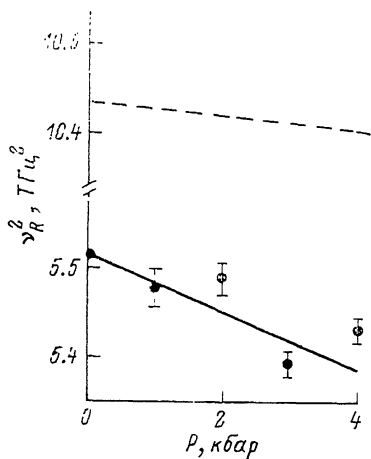


Рис. 5. Зависимость квадрата частоты моды R_{25}^2 кристалла $KZnF_3$ от давления.

Штриховая линия — наш расчет, точки — экспериментальные данные [16].

аномальные моды при изменении гидростатического давления. На рис. 6 приведены зависимости квадратов частот трех акустических колебаний в точке X от давления. Аномально ведет себя низкочастотная мода X_3 , соответствующая повороту октаэдра ZnF_6 . К сожалению, экспериментальные данные по зависимости частот колебаний кристалла K_2ZnF_4 от давления отсутствуют.

Обсуждавшиеся в данной работе результаты получены в рамках теоретической модели, которая характеризуется отсутствием каких-либо подгоночных параметров. Эти результаты показывают, что современные квантовохимические методы позволяют рассчитать фактически из первых принципов универсальные межионные потенциалы взаимодействия, пригодные для достаточно полного количественного описания широкого круга физических свойств ионных кристаллов с различной кристаллической структурой.

Естественное усовершенствование нашей модели связано с учетом поляризуемости ионов Zn^{2+} . Последовательный подход должен, конечно, состоять в эмпирическом расчете упругой силовой постоянной для взаимодействия остов—оболочка KZn . Для оценки величины эффектов, обусловленных поляризуемостью цинка, мы провели серию расчетов диэлектрических постоянных и фундаментальных частот $KZnF_3$ с различными значениями постоянной K_{Zn} (и фиксированным зарядом оболочки цинка $Y_{Zn} = -6$). Учет поляризуемости Zn^{2+} существенно приближает результаты к данным эксперимента (табл. 4), оптимальным является значение $K_{Zn} = 21.8$. При $K_{Zn} > 11$ наиболее чувствительной к величине поляризуемости Zn^{2+} оказывается самая верхняя колеба-

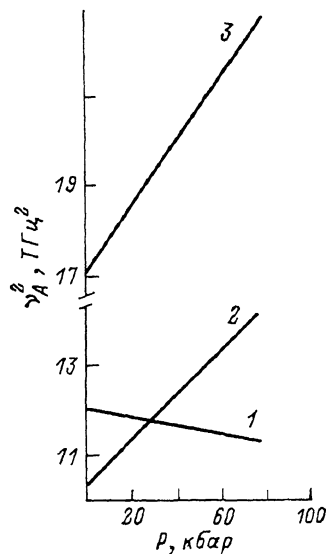


Рис. 6. Зависимость квадрата частоты акустических колебаний кристалла K_2ZnF_4 в точке X.

Прямые 1, 2, 3 соответствуют неприводимым представлениям X_3, X_6, X_1 .

тельная ветвь (ν_3), которая хуже всего описывалась в рамках исходной модели. Отметим также, что при $K_{Zn} < 11$ наша модель предсказывает возникновение в кристалле $KZnF_3$ типичной для структуры перовскита дипольной неустойчивости, связанной с размягчением одного из оптических колебаний ($\nu_1 \rightarrow 0$ при $K_{Zn} \rightarrow 10.3$) и появлением спонтанной электрической поляризации. Использование параметров $Y_{Zn} = -6$, $K_{Zn} = 21.8$ при расчете диэлектрических постоянных и частот K_2ZnF_4 также приводит к улучшению согласия с экспериментальными данными (табл. 6).

Список литературы

- [1] Computer Simulation of Solids / Ed. C. R. A. Catlow, W. C. Mackrodt. Berlin: Springer, 1982. 320 p.
- [2] Becher R. R., Sangster M. J. L., Strauch D. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. N 42. P. 7801—7817.
- [3] Wood C. P., Pyper N. C. // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 1986. V. 320. N 1. P. 71—105; Pyper N. C. // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 1986. V. 320. N 1. P. 107—158.
- [4] Шашкин С. Ю., Мазуренко В. Г., Никифоров А. Е. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 5. С. 1576—1578.
- [5] Никифоров А. Е., Шашкин С. Ю. Спектроскопия кристаллов. Л.: Наука, 1989. С. 44—61.
- [6] Lehner N., Rauh H., Strobel K., Geick R., Hegel G., Bouillot J., Renker B., Rousseau M., Stirling W. G. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. V. 15. N 32. P. 6545—6561.
- [7] Rauh H., Geick R., Lehner N., Bouillot J., Eskold G. // Phys. Stat. Sol. (b). 1983. V. 115. N 2. P. 463—470.
- [8] Rauh H., Geick R. // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. V. 127. N 1. P. 55—65.
- [9] Knox K. // Acta Crystallogr. 1961. V. 14. N 6. P. 583—585.
- [10] Herdtweck E., Babel D. // Z. Kristallographie. 1980. V. 153. N 1. P. 189—199.
- [11] Gesland J. Y., Binois M., Nouet J. // C. R. Acad. Sci. B. Paris. 1972. V. 275. N 15. P. 551—552.

- [12] Perry C. H., Young C. F. // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. N 12. P. 4616—4624.
[13] Лукин С. Н. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 5. С. 1265—1270.
[14] Strobel K., Geick R. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. V. 15. N 10. P. 2105—2114.
[15] Bouer L. L. // J. Comput. Phys. 1974. V. 16. N 2. P. 167—185.
[16] Ridou C., Rousseau M., Bouillot J., Vettier C. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1984. V. 17. N 6. P. 1004—1007.
[17] Birgeneau R. J., Chen C. Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 12. P. 1329—1332.

Уральский государственный университет
им. А. М. Горького
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
27 мая 1991 г.
В окончательной редакции
17 сентября 1991 г.