

# Колебательный спектр и упругие свойства кристалла $\text{KPb}_2\text{Cl}_5$

© К.С. Александров, А.Н. Втюрин, А.П. Елисеев\*, Н.Г. Замкова, Л.И. Исаенко\*,  
С.Н. Крылова, В.М. Пашков\*, П.П. Турчин\*\*, А.П. Шебанин\*

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия

\* Объединенный институт геологии, геофизики и минералогии Сибирского отделения Российской академии наук,  
Новосибирск, Россия

\*\* Красноярский государственный университет,  
660041 Красноярск, Россия

E-mail: vtyurin@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 22 июня 2004 г.)

Проведено экспериментальное исследование спектров комбинационного рассеяния света и упругих постоянных кристалла  $\text{KPb}_2\text{Cl}_5$ . Результаты интерпретируются с использованием беспараметрической модели динамики решетки кристалла, учитывающей мультипольные моменты электронных оболочек ионов. Достигнуто хорошее согласие результатов расчета и эксперимента. Показано, что низкие частоты фонового спектра кроме массы галогена связаны также с заметным вкладом смещений тяжелых катионов в собственные векторы высокочастотных колебаний решетки.

Работа выполнена при поддержке программы интеграции СО РАН (проект № 88), Программы поддержки ведущих научных школ (проект НШ-939.2003.2), программ Президиума РАН и ОФН РАН.

Современное развитие твердотельных систем нелинейной оптики и фотоники инфракрасного диапазона стимулирует поиск и создание новых материалов с широким окном прозрачности в ИК области (низкочастотная граница — до  $30\ \mu\text{m}$ ). В связи с этим в последнее время возрос интерес к исследованию оптических и спектральных свойств сложных галогенидов, содержащих тяжелые катионы, которые обладают относительно коротким фоновым спектром в отличие от традиционных оксидных систем.

Кристаллы семейства  $\text{Me}^+\text{Pb}_2\text{Hal}_5$  (здесь  $\text{Me}^+$  — щелочной металл, Hal — галоген) обладают таким окном прозрачности в ИК диапазоне; для них разработаны методики выращивания достаточно объемных монокристаллических образцов [1]. Эти кристаллы достаточно устойчивы к атмосферным воздействиям в отличие от многих других сложных галогенидов. Довольно рыхлая упаковка ионов большого радиуса в решетке обуславливает широкие возможности для вариаций состава и свойств кристаллов и открывает перспективу их использования в качестве активных лазерных сред [2]. В то же время общефизические свойства этих кристаллов изучены достаточно слабо.

Настоящая работа посвящена излучению колебательного спектра и упругих свойств кристалла  $\text{KPb}_2\text{Cl}_5$ , относящегося к этому семейству. Проведение такого исследования позволяет, с одной стороны, определить природу формирования низкочастотной границы окна прозрачности кристалла, установить, какие структурные единицы и взаимодействия определяют ее положение. С другой стороны, это дает возможность получить в рамках того же подхода информацию о связи структуры кристалла с его упругими константами, интересными как с точки зрения материаловедческой характеристики вещества, так и для возможных его применений в акустооптических устройствах ИК диапазона.

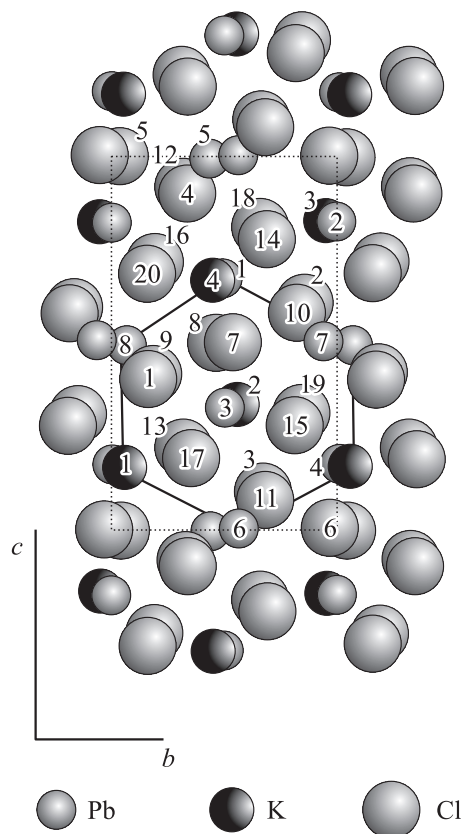
Для интерпретации колебательного спектра, установления связи частот колебаний решетки с ее структурой был использован недавно развитый первопринципный подход [3–5]. Необходимо отметить, что традиционно применяемые для этой цели эмпирические методы (см., например, [6,7]) в случае низкосимметричных структур с большим количеством атомов в элементарной ячейке приводят к необходимости введения большого количества подгоночных параметров, определить которые, используя ограниченный набор экспериментальных данных, не удастся. В связи с этим использование беспараметрических методов становится принципиально важным.

## 1. Методики измерений

Кристаллы  $\text{KPb}_2\text{Cl}_5$  относятся к моноклинной пространственной группе  $P2_1/c$ ,  $a = 8.854(2)\ \text{\AA}$ ,  $b = 7.927(2)\ \text{\AA}$ ,  $c = 12.485(3)\ \text{\AA}$ ,  $\beta = 90.05(3)^\circ$ ,  $V = 876.3(4)\ \text{\AA}^3$ ,  $Z = 4$ , плотность  $4.781\ \text{g/cm}^3$ . Координаты атомов приведены в табл. 1, проекция структуры на плоскость  $bc$  показана на рис. 1 [8].

**Таблица 1.** Атомные координаты ( $\times 10^4$ ) для кристалла  $\text{KPb}_2\text{Cl}_5$

	X	Y	Z
K(1)	5092(5)	514(6)	1696(4)
Pb(1)	65(1)	58(1)	1742(1)
Pb(2)	2547(1)	4359(1)	9937(1)
Cl(1)	9585(4)	1655(5)	4023(3)
Cl(2)	2218(4)	405(4)	9986(3)
Cl(3)	5401(5)	1798(6)	4186(4)
Cl(4)	2355(5)	3117(5)	2204(3)
Cl(5)	7702(6)	3449(5)	1885(3)



**Рис. 1.** Проекция структуры кристалла  $KPb_2Cl_5$  на плоскость  $bc$ . Показана псевдогексагональная упаковка вытянутых в направлении  $a$  каналов, содержащих катионы металлов. Цифры — номера ионов в соответствии с рис. 4.

Для получения монокристаллов оптического качества исходные реагенты  $PbCl_2$  и  $KCl$  очищались многократной перекристаллизацией. Кристаллы  $KPb_2Cl_5$  выращивали методом Бриджмена в двузонной печи. Линейный температурный градиент печи в ростовой зоне составлял около  $20\text{ K/cm}$ , скорость движения ампулы в холодную зону —  $2\text{--}4\text{ mm/day}$ . Более подробно методика описана в [9]. Кристаллическая структура определялась при комнатной температуре с помощью монокристаллического дифрактометра STOE STADI4 с использованием  $MoK_\alpha$ -излучения ( $2\theta_{\max} = 80^\circ$ ). Образцы для экспериментов выбирались таким образом, чтобы исключить видимые в поляризационный микроскоп включения или дефекты, и готовились механической обработкой с последующей полировкой в растворе соляной кислоты.

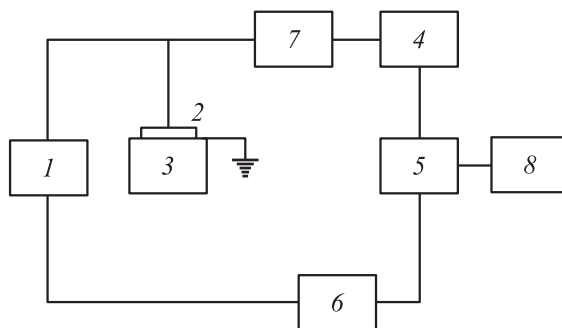
Для получения спектров КР в качестве источника возбуждения было использовано поляризованное излучение  $514.5\text{ nm}$   $Ar^+$  лазера мощностью  $500\text{ mW}$ . Спектры были получены на спектрометре U-1000 (I.S.A. Jobin Yvon, Франция). Для экспериментов использовались образцы размером  $2 \times 2 \times 4\text{ mm}$  с ребрами, ориентированными по кристаллографическим осям кристалла.

Определение модулей упругости  $C_{\lambda\mu}$  выполнено методом измерения скоростей объемных акустических волн

(ОАВ) с последующим решением обратной задачи кристаллоакустики.

Для измерения скоростей ОАВ использовалось четыре образца монокристалла в виде прямоугольных параллелепипедов с линейными размерами около  $6\text{ mm}$ . Направления нормалей к граням для первого образца совпадали с направлениями кристаллофизических осей (направления  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$ ). Грани трех оставшихся образцов были перпендикулярны осям системы координат, полученной из исходной поворотами на  $45^\circ$  относительно осей  $X_1$  (направления  $[100]$ ,  $[0\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}]$  и  $[0\frac{-1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}]$ ),  $X_2$  (направления  $[\frac{1}{\sqrt{2}}0\frac{1}{\sqrt{2}}]$ ,  $[010]$  и  $[\frac{-1}{\sqrt{2}}0\frac{1}{\sqrt{2}}]$ ) и  $X_3$  (направления  $[\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}0]$ ,  $[\frac{-1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}0]$  и  $[001]$ ) соответственно. В рассматриваемой симметрии кристалла указанный набор направлений позволяет для каждого измеряемого значения скорости выполнить два независимых измерения в различных кристаллофизических направлениях. Рентгеновская ориентировка образцов была выполнена с точностью не хуже  $\pm 5'$ . Плоскопараллельность противоположных граней образцов — не хуже  $\pm 2\text{ }\mu\text{m/m}$ .

Скорости продольных и сдвиговых ОАВ были измерены импульсным ультразвуковым методом [10], блок-схема установки приведена на рис. 2. Принцип работы установки основан на измерении времени распространения ультразвукового импульса в образце. Короткий ( $10\text{ ns}$ ) видеоимпульс с генератора 1 подается на пьезопреобразователь 2 (для измерения скоростей ОАВ использованы пьезопреобразователи на основе ниобата лития с резонансной частотой  $29.5\text{ MHz}$ ) и после многократного отражения в образце 3 серия импульсов, предварительно усиленная услителем 4, визуальнo регистрируется осциллографом 5. Основная последовательность импульсов измерителя временных интервалов 6 запускает генератор 1, последовательность задержанных импульсов синхронизирует развертку осциллографа 5. Экспериментально процедура измерений состоит в определении временного промежутка между



**Рис. 2.** Блок-схема ультразвуковой экспериментальной установки. 1 — генератор видеоимпульсов Г5-11, 2 — пьезопреобразователь, 3 — образец, 4 — резонансный усилитель У2-5 ( $30\text{ MHz}$ ), 5 — стробоскопический осциллограф С7-9, 6 — измеритель временных интервалов И2-26, 7 — диодный ограничитель амплитуды зондирующего импульса, 8 — аналогоцифровой преобразователь 9 — АЦП 1.

двумя последовательно расположенными отраженными радиоимпульсами на экране осциллографа. Примененная схема позволяет получить точность  $10^{-2}\%$  при абсолютных и  $10^{-4}\%$  при относительных измерениях скоростей ОАВ.

## 2. Результаты и обсуждение

2.1. Колебательный спектр. Разложение колебательного представления по неприводимым в центре зоны Бриллюэна имеет вид

$$\Gamma = 24A_g(xx, yy, zz, xy, yx) + 24B_g(xz, zx, yz, zy) + 24A_u + 24B_u, \quad (1)$$

где в скобках указаны компоненты тензора КР, в которых активны соответствующие колебания решетки. Отметим, что ввиду низкой симметрии и сложной структуры кристалла выделить моды колебаний, связанные отдельными атомарными подрешетками, на основании теоретико-групповых соображений не представляется возможным.

Полученные экспериментально спектры комбинационного рассеяния кристалла  $\text{KРb}_2\text{Cl}_5$  при комнатной температуре представлены на рис. 3. Как и ожидалось, спектр ограничен низкими частотами; все наблюдаемые линии лежат ниже  $250 \text{ cm}^{-1}$ . Обращает на себя внимание сильная анизотропия спектра, высокая поляризация спектральных линий. Количество хорошо определенных пиков несколько меньше числа, определенного согласно (1), и для их интерпретации необходимо выполнить их соотнесение с результатами модельного расчета.

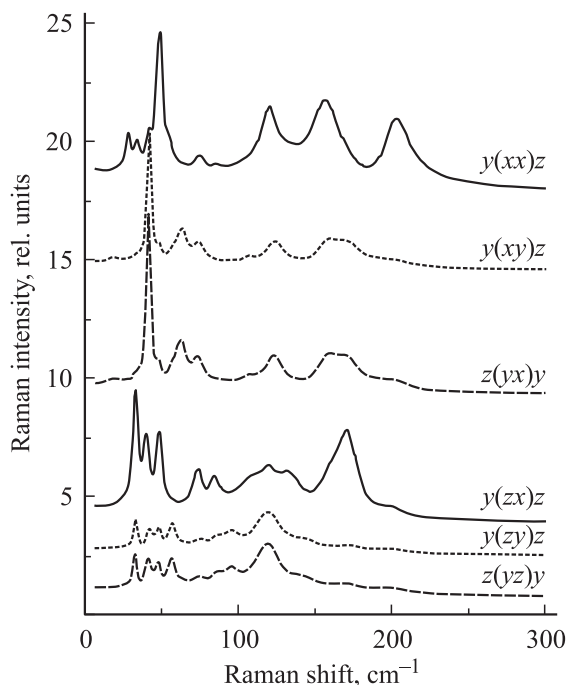


Рис. 3. Поляризованные спектры комбинационного рассеяния кристалла  $\text{KРb}_2\text{Cl}_5$ .

Таблица 2. Рассчитанные параметры межионных взаимодействий в кристалле  $\text{KРb}_2\text{Cl}_5$

Параметры	$\text{K}^+$	$\text{Pb}^{2+}$	$\text{Cl}^-$
$R_W, \text{Å}$	1.85	1.85	1.16
$\alpha_d, \text{Å}^3$	0.7	1.6	3.3
$\alpha_q, \text{Å}^5$	0.9	1.5	5.8

Расчет колебательного спектра кристаллической решетки  $\text{KРb}_2\text{Cl}_5$  проведен в рамках обобщенной модели Гордона–Кима [3,4], в которой учитываются искажения электронной плотности составляющих кристалл ионов. Учет этих искажений особенно важен для низкосимметричных структур, поскольку взаимодействия возникающих в них мультипольных моментов ионов вносят существенный вклад в полную энергию решетки и частоты колебаний кристалла.

Следуя [3,4], распределение электронной плотности каждого иона рассчитывалось в присутствии внешних полей соответствующей симметрии

$$V_{\text{ext}}^{(l)} = r^{(l)} P_l(\cos \theta), \quad (2)$$

где  $P_l(\cos \theta)$  — полиномы Лежандра. В качестве сферически симметричной компоненты внешнего поля использовался потенциал сферы Ватсона

$$V_W = \begin{cases} -Z_{\text{ion}}/R_W, & r < R_W \\ -Z_{\text{ion}}/r, & r > R_W \end{cases}. \quad (3)$$

При расчетах учитывались дипольные ( $l = 1$ ) и квадрупольные ( $l = 2$ ) искажения электронной плотности.

Значения радиусов сфер Ватсона для каждого иона определялись путем минимизации полной энергии кристалла и приведены в табл. 2. Там же показаны дипольные ( $\alpha_d$ ) и квадрупольные ( $\alpha_q$ ) поляризуемости ионов, рассчитанные с помощью модифицированного уравнения Штенхаймера [3,4]. Соответствующие им значения индуцированных дипольных  $P$  и квадрупольных  $Q$  моментов находились из условия минимума полной энергии кристалла по отношению к соответствующему моменту:  $\partial E / \partial P_\alpha = 0$ ,  $\partial E / \partial Q_{\alpha\beta} = 0$ . Выражения для расчета полной энергии кристалла, дипольных и квадрупольных моментов, а также динамической матрицы приведены в [4,5].

Равновесные значения параметров решетки уточнялись по минимуму полной энергии кристалла как функции этих параметров, при этом использовались экспериментальные значения координат атомов в элементарной ячейке (табл. 1); полученные в результате значения  $a = 8.7 \text{ Å}$ ,  $b = 7.6 \text{ Å}$ ,  $c = 12.5 \text{ Å}$  хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Для собственных векторов, полученных в результате диагонализации динамической матрицы, был проведен симметричный анализ. Построено полное колебательное

**Таблица 3.** Экспериментальные и расчетные частоты колебаний решетки кристалла  $KPb_2Cl_5$ , активные в спектре КР

$A_g, \omega, \text{cm}^{-1}$		$B_g, \omega, \text{cm}^{-1}$	
Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент
34i		38i	
26i		28i	
25i		6	
21	18	28	33
34	27	39	40?
41	35	45	42
45	43	46	48
53	50	57	57
57	56	64	
58		67	
60	62	71	
67		74	75
73	73	80	85
76		84	
86	85	90	88
91		95	95
92		100	
101		103	108
106	108	107	119
110	120	115	132
123	124	120	144
129	127	129	158
134	132	140	173
159	200?	161	202

представление  $P(g)$  пространственной группы кристалла, на основе которого были вычислены операторы проектирования [11]

$$\Gamma_\rho = \frac{N(\rho)}{N(g)} \sum_{g \in G} \chi_\rho(g) \Gamma(g), \quad (4)$$

где  $N(\rho)$  — размерность представления  $\rho$  точечной операции симметрии,  $N(g)$  — размерность группы симметрии,  $\chi_\rho(g)$  — характер матрицы неприводимого представления  $\rho$ ,  $\Gamma(g)$  — колебательное представление операции симметрии данного неприводимого представления  $\rho$  группы  $G$ ,  $\Gamma_\rho$  — оператор проектирования, суммирование проводится по всем операциям группы симметрии. Собственный вектор колебания  $\mathbf{f}$  преобразуется по неприводимому представлению  $\rho$  группы  $G$ , если он удовлетворяет критерию [11]

$$\Gamma_\rho \mathbf{f} = \frac{N(g)}{N(\rho)} \mathbf{f}. \quad (5)$$

Данный алгоритм разложения собственных векторов динамической матрицы по неприводимым представлениям был реализован в программном пакете Mathematica 4.2.

Полученные в результате эксперимента частоты линий спектра КР и их соотношение с рассчитанными значениями показаны в табл. 3. Отметим, что наблюдается хорошее согласие полученных значений в средней

части спектра. В области самых низких (менее  $20 \text{ cm}^{-1}$ ) частот результаты расчета сильно зависят от малых изменений координат атомов — их вариация в пределах ошибки эксперимента может приводить к значительным (до 100%) изменениям частот колебаний.

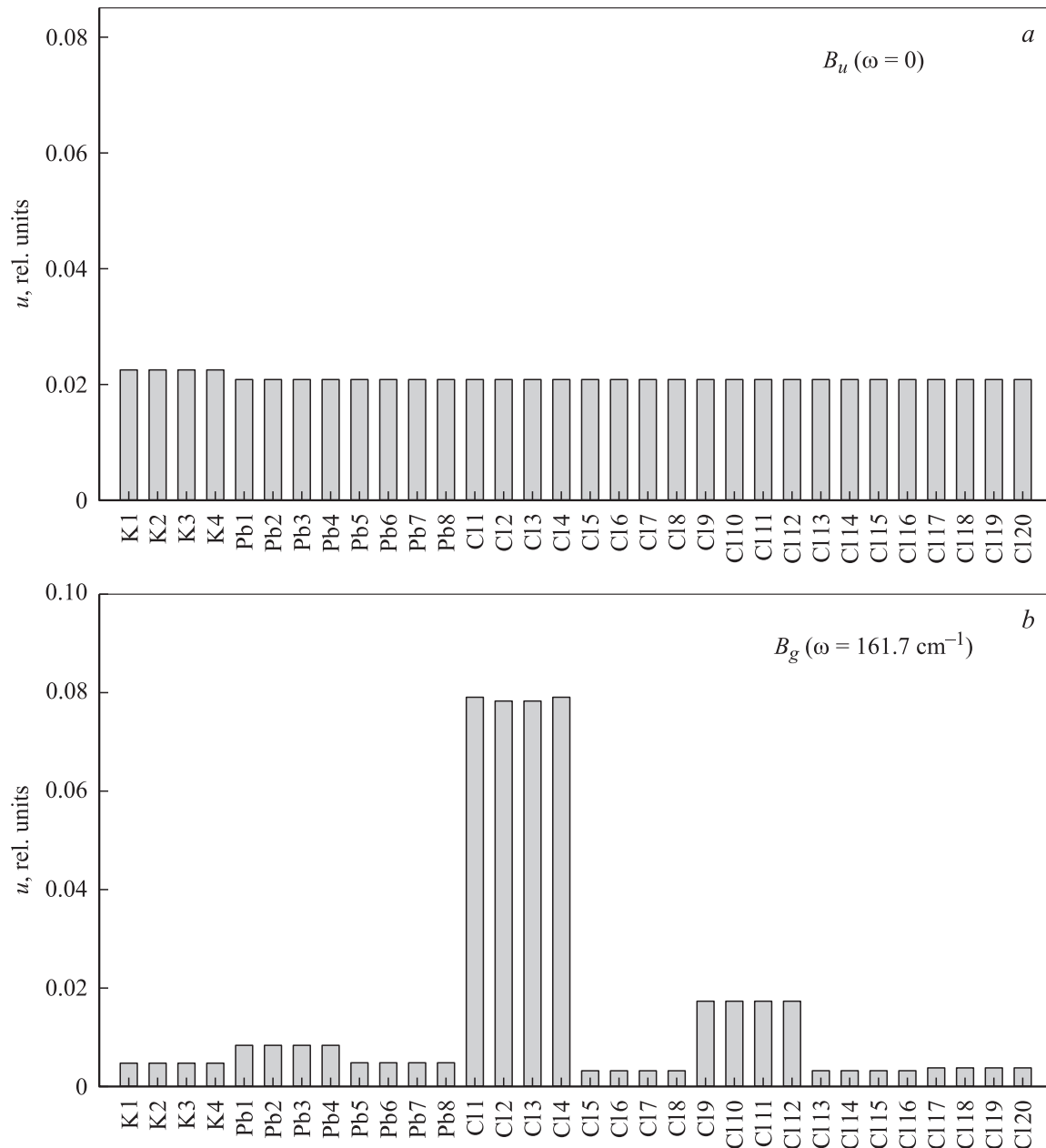
На рис. 4 показаны относительные вклады смещений атомов решетки в собственные векторы соответствующих мод (учтена перенормировка на массы ионов). Для проверки правильности процедуры выполнен расчет смещений атомов для акустической моды; результат, подтверждающий ее корректность, показан на рис. 4, *a*. На рис. 4, *b* представлены смещения, соответствующие самой высокочастотной моде спектра, которая определяет границу окна прозрачности кристалла. Из рисунка видно, что, хотя наибольшие смещения и соответствуют ионам хлора, тем не менее вклад тяжелых ионов металлов в собственный вектор этого колебания остается значительным, с чем, видимо, и связано относительно низкое значение соответствующей частоты (по сравнению, например, с высокосимметричными перовскитоподобными хлоридными системами [15]).

Отметим, что, как видно на рис. 4, *c–4, e*, низкая симметрия структуры приводит к сильному взаимодействию колебаний атомарных подрешеток практически во всех модах колебаний; в частности, даже самые низкочастотные моды содержат значительный вклад смещений легких ионов хлора.

2.2 Упругие константы. Задача определения модулей упругости  $C_{\lambda\mu}$  методом измерения скоростей

**Таблица 4.** Скорости ОАВ в монокристалле  $KPb_2Cl_5$  (эксперимент)

№	Направление распространения	Тип волны	Поляризация	Скорость, m/s
1	[001]	QL	[001]	2766.2
2		SS	[010]	1520.8
3		QSF	[100]	1532.6
4	$[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} 0]$	QL	$[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} 0]$	3027.4
5		QSS	$[\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} 0]$	1442.5
6		QSF	[001]	1529.1
7	[010]	L	[010]	2717.8
8		SF	[001]	1731.3
9		SS	[100]	1521.0
10	$[\frac{1}{\sqrt{2}} 0 \frac{1}{\sqrt{2}}]$	QL	$[\frac{1}{\sqrt{2}} 0 \frac{1}{\sqrt{2}}]$	2894.0
11		QSS	$[\frac{-1}{\sqrt{2}} 0 \frac{1}{\sqrt{2}}]$	1464.6
12		SF	[010]	1610.2
13	[100]	QL	[100]	3010.3
14		QSS	[001]	1532.8
15		SF	[010]	1730.6
16	$[0 \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}}]$	QL	$[0 \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}}]$	2778.9
17		QSS	$[0 \frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}}]$	1471.5
18		QSF	[100]	1637.7



**Рис. 4.** Относительная амплитуда колебаний ионов акустической моды (а), высокочастотной моды (б) и низкочастотной моды (с). d — относительная амплитуда колебаний ионов моды среднего диапазона, активной в КР спектре; e — относительная амплитуда колебаний ионов полярной моды, неактивной в спектре КР.

ОАВ для моноклинных сред решена в [12] и подробно обсуждается в [13]. В выбранной кристаллографической установке матрица модулей упругости кристалла имеет вид [14]

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & C_{15} & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & C_{25} & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & C_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{46} & 0 & C_{66} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Раздельное определение независимых модулей упругости проведено методом особенных направлений [12,13]. Результаты измерений скоростей ОАВ и их основные характеристики приведены в табл. 4. Погрешность экспериментального определения скоростей ОАВ не превышает 0.5 m/s.

Значения упругих модулей  $C_{\lambda\mu}$  вычисляются из известных собственных значений  $\rho v^2$  тензора Грина–Кристоффеля [13]  $\Gamma_{\alpha\gamma} = C_{\alpha\beta,\gamma\delta} n_\beta n_\delta$  путем решения уравнений Грина–Кристоффеля  $(\Gamma_{\alpha\gamma} - \rho v^2 \delta_{\alpha\gamma}) U_\delta = 0$  для каждого из кристаллофизических направлений. Здесь  $\rho = 4.780 \text{ g/cm}^3$  — плотность исследуемого кристалла;

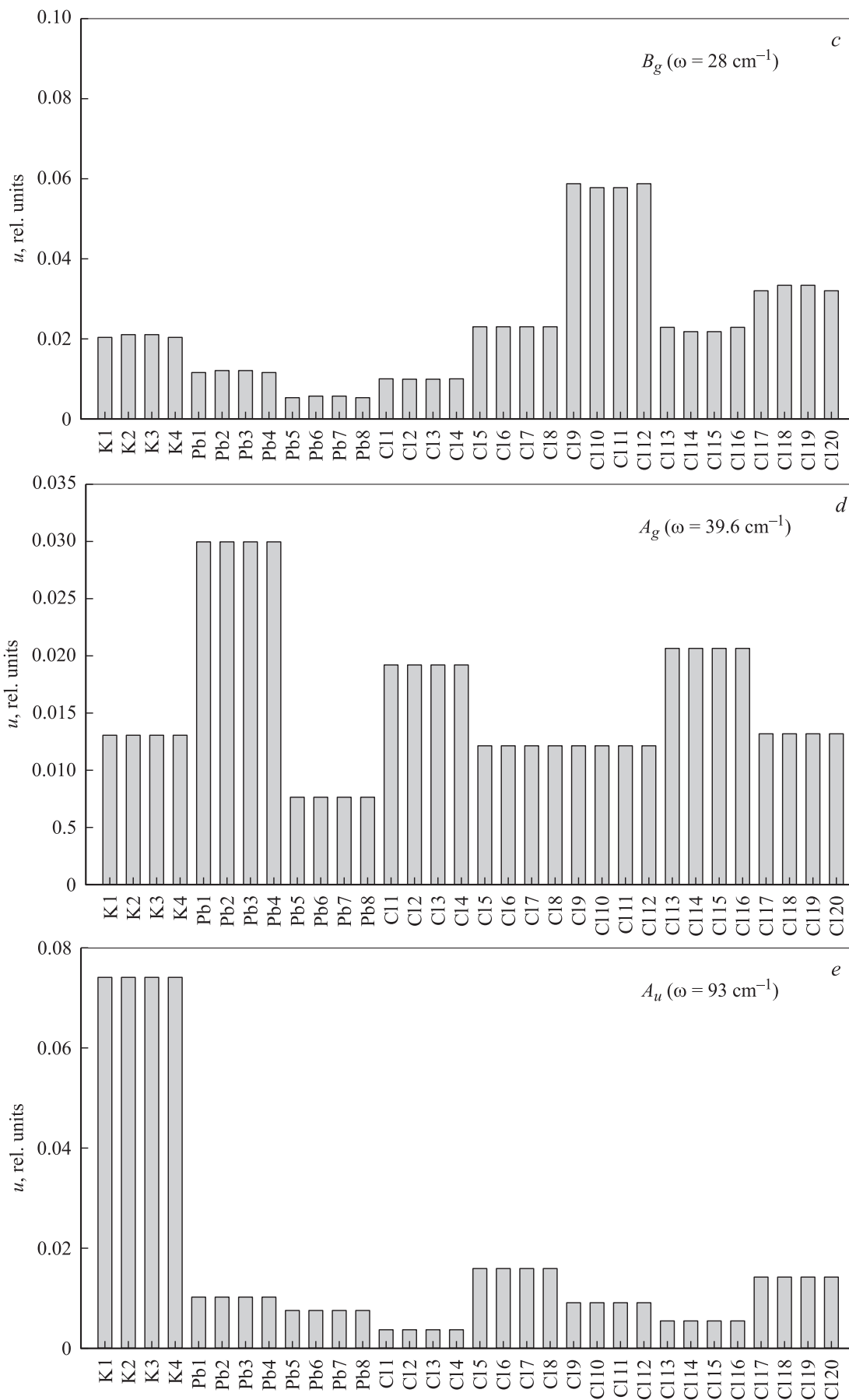


Рис. 4 (продолжение).

Таблица 5. Экспериментальные и расчетные значения упругих констант кристалла  $\text{KРb}_2\text{Cl}_5$  ( $10^{10}$  н/м<sup>2</sup>)

Константа	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{15}$	$C_{22}$	$C_{23}$	$C_{25}$	$C_{33}$	$C_{35}$	$C_{44}$	$C_{46}$	$C_{55}$	$C_{66}$
Эксперимент	4.34	1.93	1.77	-0.55	3.53	1.52	0.05	3.62	0.06	1.11	0.03	1.10	1.43
Расчет	4.00	1.30	1.37	-0.03	3.87	1.42	0.01	3.47	0.01	1.30	0.03	1.30	1.24

$\nu$  — скорость ОАВ с поляризацией  $U_\delta$ ;  $n_\alpha$  — направляющие косинусы волновой нормали;  $C_{\alpha\beta,\gamma\delta}$  — тензор модулей упругости, компоненты которого связаны с их матричным представлением  $C_{\lambda\mu}$  известным преобразованием Фохта [14].

Вычисление значений упругих констант монокристалла выполнено в последовательности, изложенной в [12,13]. Полученные в результате значения модулей упругости в единицах  $10^{10}$  н/м<sup>2</sup> приведены в табл. 5. В этой же таблице приведены значения упругих констант, рассчитанных в модели Гордона–Кима. Для centrosymmetric кристаллов упругие константы связаны с динамической матрицей кристалла выражениями [6]

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = [\alpha\beta, \gamma\delta] + [\gamma\beta, \alpha\delta] - [\alpha\gamma, \beta\delta],$$

$$[\alpha\beta, \gamma\delta] = \frac{1}{2V} \sum_{k,k'=1}^{N_a} \sqrt{m_k m_{k'}} D_{kk',\alpha\beta}^{\gamma\delta}, \quad (7)$$

где  $V$  — объем элементарной ячейки;  $k, k'$  — номера ионов;  $N_a$  — число ионов в ячейке;  $m_k$  — массы ионов,

$$D_{kk',\alpha\beta}^{\gamma\delta} = \left. \frac{\partial^2 D_{kk',\alpha\beta}}{\partial q_\gamma \partial q_\delta} \right|_{q=0}$$

— коэффициенты разложения динамической матрицы  $D$  по волновому вектору  $\mathbf{q}$  при члене второго порядка.

Сравнение определенных экспериментально и рассчитанных величин показывает их хорошее согласие.

Таким образом, в результате проведенных исследований получены поляризованные спектры комбинационного рассеяния света кристалла  $\text{KРb}_2\text{Cl}_5$  и выполнена их интерпретация с использованием беспараметрической модели, учитывающей высшие мультипольные моменты ионов кристаллической решетки. Показано, что развитая модель позволяет достичь хорошего согласия расчетных и экспериментальных частот колебательного спектра ионного кристалла сложной низкосимметричной структуры. Определены и проанализированы собственные векторы колебаний решетки; установлено, что низкие частоты фонового спектра связаны с заметным (хотя и малым) вкладом тяжелых катионов даже в собственные векторы наиболее высокочастотных мод колебаний.

Экспериментально и теоретически в рамках того же подхода определены упругие константы кристалла; также достигнуто хорошее согласие экспериментальных и расчетных значений.

Авторы благодарят В.И. Зиненко за полезное обсуждение результатов.

## Список литературы

- [1] K. Nitsch, M. Dusek, M. Nikl, K. Polak, M. Rodova. *Progr. Cryst. Growth Charact. Mat.* **30**, 1 (1995).
- [2] R. Balda, J. Fernandez, A. Mendioroz, M. Voda, M. Al-Saleh. *Phys. Rev. B* **68**, 165 101 (2003).
- [3] О.В. Иванов, Д.А. Шпорт, Е.Г. Максимов. *ЖЭТФ* **114**, 333 (1998).
- [4] N.G. Zamkova, V.I. Zinenko, O.V. Ivanov, E.G. Maksimov, S.N. Sofronova. *Ferroelectrics* **283**, 49 (2003).
- [5] А.Н. Втюрин, С.В. Горайнов, Н.Г. Замкова, В.И. Зиненко, А.С. Крылов, С.Н. Крылова, А.Д. Шефер. *ФТТ* **46**, 1261 (2004).
- [6] М. Борн, Хуан Кунь. *Динамическая теория кристаллических решеток*. Изд-во иностр. лит., М. (1958). 388 с.
- [7] М.Б. Смирнов. В сб.: *Динамическая теория и физические свойства кристаллов* / Под ред. А.Н. Лазарева. Наука, СПб (1992). С. 41.
- [8] А.А. Меркулов, Л.И. Исаенко. Труды V международной конференции „Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение“. Александров (2001). С. 83.
- [9] А.А. Меркулов, Л.И. Исаенко. *Структурная химия* **45**, 724 (2004).
- [10] Б.П. Сорокин, П.П. Турчин, Д.А. Глушков. *ФТТ* **36**, 2907 (1994).
- [11] Г. Штрайтвольф. *Теория групп в физике твердого тела*. Мир, М. (1971). 262 с.
- [12] К.С. Александров. *Кристаллография* **3**, 630 (1959).
- [13] К.С. Александров, Г.Т. Продайвода. *Анизотропия упругих свойств минералов и горных пород*. Изд-во СО РАН, Новосибирск (2000), 353 с.
- [14] Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. *Основы кристаллофизики*. Наука, М. (1975). 680 с.