

УДК 536.42.1

© 1993

## МЕХАНИЗМ РЕКОНСТРУКТИВНОГО ПЕРЕХОДА В1–В2 В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Ю.М. Гуфан, И.В. Терновский

Предложен механизм перехода В1–В2 в щелочно-галогидных кристаллах на основе деформации простого сдвига. Показано, что отличие ориентационных соотношений для перехода в кристаллах CsCl и галоидах K и Rb связано с различной ориентацией смещающихся плоскостей при переходе. Приведен вывод зависимости параметра порядка Ландау феноменологической теории от параметра перехода — величины относительного сдвига плоскостей. На основе предложенного механизма для канонического потенциала построена единая фазовая диаграмма щелочно-галогидных кристаллов. Область фазовой диаграммы, соответствующая переходу В1–В2, качественно совпадает с приведенными в литературе экспериментальными диаграммами  $P$ – $T$ .

Ряд галогенидов щелочных металлов K, Cs, Rb, а также  $\text{NH}_4$  испытывают обратимое полиморфное превращение В1 (тип NaCl, пространственная группа  $O_h^5$ )–В2 (тип CsCl, пространственная группа  $O_h^1$ ) при изменении температуры либо давления. Как указывается в [1–3], процесс полиморфных превращений в этих веществах имеет много общих черт с мартенситными превращениями в металлах и сплавах.

Известно, что кристаллогеометрическая схема рассматриваемого перехода сводится к появлению в решетке закономерно ориентированной деформации сдвига [1]. Действительно, рассмотрим примитивную ячейку структуры В1 (рис. 1, а). Она представляет собой ромбоэдр с ребрами равной длины, образованный тремя минимальными трансляциями кубической гранецентрированной ячейки. Очевидно, что этот ромбоэдр является искажением элементарной ячейки структуры В2, а именно растяжением этой ячейки вдоль одной из главных диагоналей при минимальном изменении длины ребер и расстояния между центром куба и ближайшими к нему вершинами. Такое растяжение соответствует равенству всех недиагональных элементов в тензоре деформации. Как показано в [4, 5], недиагональные компоненты тензора деформации преобразуются по неприводимому представлению  $\tau_7$  группы  $O_h$ , а пространственная группа, образующаяся при такой деформации, —  $D_{3d}^3$ . Механизм перехода В1–В2, основанный на деформации вдоль главной диагонали, был предложен Бюрджером [6]. Указанный механизм перехода не противоречил эксперименту до тех пор, пока не были получены данные по ориентационным соотношениям, т.е. ориентации кристаллографических осей и направлений структур В1 и В2 по отношению друг к другу.

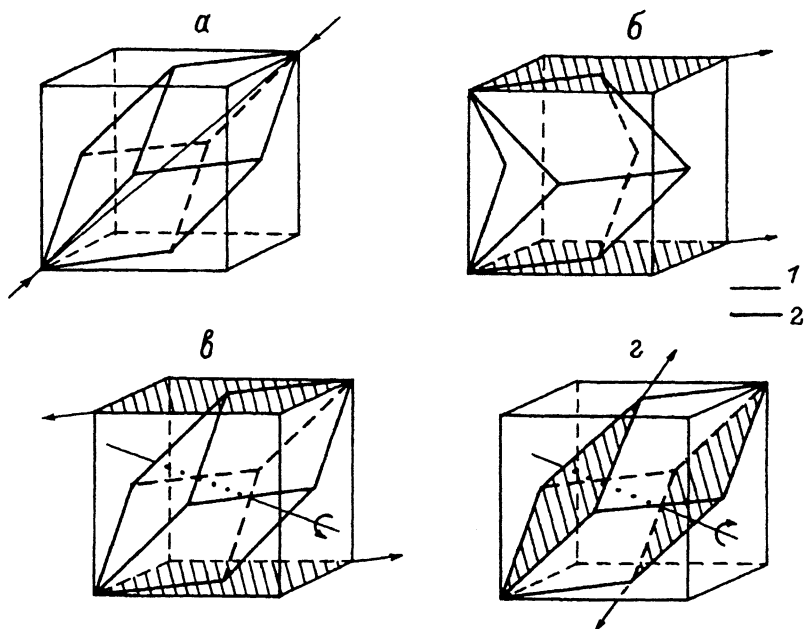


Рис. 1. Различные механизмы переходов В1-В2.

*a* — механизм Бюргера; *б* — механизм Ватанабе для CsCl; *в, г* — механизм сдвиговой деформации для CsCl и для галогенидов К и Rb соответственно. 1 — элементарная ячейка структуры В1, 2 — искаженная в соответствии с предложенным механизмом элементарная ячейка структуры В2.

В [7] был предложен новый механизм перехода В1-В2, правильно описывающий ориентационные соотношения для CsCl. Этот механизм значительно отличается от предложенного Бюргером для всего класса щелочно-галогидных кристаллов. В работе [8] указывается, что для галогенидов К и Rb ориентационные соотношения отличаются как от [7], так и от соотношений, следующих из механизма Бюргера. В [9] для щелочно-галогидных кристаллов приведено 6 типов ориентационных соотношений и на основе некоторых из них рассчитывается химический потенциал. Таким образом, не существует полного понимания механизма перехода для близких по свойствам и одинаковых по структуре веществ; предлагаются различные механизмы переходов.

Исследование механизмов переходов в щелочно-галогидных кристаллах в рамках феноменологической теории фазовых переходов и является целью настоящей работы.

Особенностью описываемого полиморфизма является то, что гистерезис перехода В1-В2 при определенных условиях значительно уменьшается. Действительно, как отмечается в [1,2], при повышении температуры в KCl, а также в галогенидах рубидия, процесс приобретает черты немартенситных превращений. Повышение температуры приводит к значительному уменьшению величины гистерезиса [1,2]. (В [2] приведены *T-P* диаграммы превращений RbCl, RbBr, RbI). В частности, указывается, что для галогенидов рубидия при температуре выше 120° для В1-В2

и выше  $+20^\circ$  для В2-В1 превращение происходит быстро, но плавно, без заметных скачков, характерных для перехода при температуре нижеуказанных величин.

Значительное уменьшение гистерезиса с ростом температуры говорит о сходстве таких переходов с переходами первого рода, близких ко второму, и о возможности рассмотрения в рамках феноменологической теории Ландау. Такая возможность появилась в связи с тем, что в последние годы в серии работ [10-13] были предложены основные принципы построения симметрично-обоснованных моделей реконструктивных фазовых переходов. Этот метод был применен для описания  $\beta-\omega$  переходов в никель-титановых сплавах, фазовых переходов между плотноупакованными структурами А1 и А3, а также А1-А2 и А2-А3 [11].

Важным для нас результатом феноменологической теории [10-13] является доказательство того, что реконструктивные переходы можно описывать в схеме теории Ландау переходов второго рода и что они действительно могут быть близки к фазовым переходам второго рода.

## 1. Анализ механизмов перехода В1-В2

Приведем анализ предложенных механизмов и ориентационных соотношений, придерживаясь следующего предположения: расстояния между атомами — ближайшими соседями — при непрерывном искажении ячейки должны отклоняться от исходных незначительно. (Это предположение допускает изменение числа ближайших соседей). Выполнение этого предположения позволит исключить состояния, в которых потенциальная энергия кристалла значительно возрастает.

Проанализируем механизм перехода в ScCl, предложенный в работе [7]. В [7] рассматривается фазовый переход В2-В1 в монокристаллах ScCl, происходящий при температуре  $446^\circ\text{C}$ . Здесь ориентационные соотношения определялись с помощью рентгеноструктурного анализа как для В2-В1 с повышением температуры, так и для В1-В2. Они имеют вид

$$[100]В1 \parallel [110]В2; \quad [011]В1 \parallel [001]В2.$$

(Индексы Миллера в квадратных скобках обозначают направления, в круглых — плоскости). В этой работе указывается, что ориентационные соотношения, предложенные ранее [14] для CsCl, не совпадают ни с полученными ранее, ни с соотношениями, следующими из механизма Бюргера.

Параметр ячейки структуры В2 при  $t = 446 \pm 2^\circ\text{C}$  составляет  $4.227 \pm 0.004 \text{ \AA}$ , а структуры В1 при той же температуре  $7.077 \pm 0.003 \text{ \AA}$ . Объем, приходящийся на химическую формулу в точке перехода, меняется от  $75.53 \text{ \AA}^3$  для структуры В2 до  $88.61 \text{ \AA}^3$  для структуры В1. (Таким образом, объем ячейки увеличивается на 17.3% по сравнению со структурой В2). В [7] отмечается значительная анизотропия расширения кристалла. Основное расширение, составляющее 15% изменения длины, происходит в одном из шести эквивалентных направлений  $[110]В2$ . Расширение происходит в направлении движения фронта перехода В2-В1. В [7] отмечается, что площадь, приходящаяся на химическую формулу в плоскости  $(100)В2-(100)В1$ , при переходе меняется только на 0.9%.

Сравнение параметров ячеек структур В1 и В2 говорит о том, что ближайшие расстояния между ионами меняются незначительно. Действительно, при одной и той же температуре  $t = 446^\circ\text{C}$  кратчайшее расстояние между позициями ионов разного сорта в структуре В2 составляет  $3.661 \text{ \AA}$ , в структуре В1— $3.539 \text{ \AA}$ , а расстояние между позициями ионов одного сорта в структуре В2— $4.227 \text{ \AA}$ , в структуре В1— $5.004 \text{ \AA}$ .

Элементарные расчеты [15] для таких расстояний между позициями ионов указывают, что энергия Маделунга при переходе В2-В1 изменяется на 2.6%.

В [7] предложен механизм перехода В1-В2, отличающийся от механизма Бюргера. А именно структура меняется слой за слоем, при этом происходят два вида движения: межслоевое переупорядочение и внутрислоевое трансляционное движение [7]. К сожалению, описание механизма перехода в [7] неполное. На основе рисунков, приведенных в статье [7], опишем более подробно смещение позиций ионов.

Согласно [7], переход В1-В2 произойдет при смещении каждой второй плоскости (100)В1 в направлении [011]В1 (рис. 1, б). На рис. 2 представлены сечения кристалла вдоль плоскости (011)В1 (а), (011)В1 (в). В результате смещения ионы А, В, С и D оказываются в одной плоскости (рис. 2, в), образуя ромб. При дополнительных искажениях, в частности чистом сдвиге А-А', В-В', образуется квадрат А'С'В'Д', который служит основанием элементарной ячейки структуры В2.

Таким образом, переход происходит по неприводимому представлению  $\tau_{10}$  звезды вектора  $\mathbf{K}_{10}$  [11]. При переходе происходит удвоение ячейки с образованием пространственной группы  $D_{2h}^{13}$ . Дополнительные искажения, переводящие указанную низкосимметричную структуру в структуру В2, соответствуют компонентам тензора деформации. Искажение такого типа не может быть индуцировано представлением  $\tau_{10}$  [16]. Следовательно, для полного описания перехода необходимо привлечь второй параметр порядка, преобразующийся так же, как и компоненты тензора деформации.

Предложенный в [7] механизм перехода хорошо согласуется с наблюдаемым на эксперименте расширением кристалла, однако предполагает мультипликацию ячейки. Следовательно, переход по механизму [7] должен сопровождаться появлением лучевых доменов. Однако описание перехода в [7] свидетельствует, по-видимому, об отсутствии мультипликации ячейки, а изменения структуры близки к тому, что можно получить при деформации монокристалла. Действительно, как отмечается в [7], если переход В2-В1 завершен, то обратный переход В1-В2 начинается при температуре на  $15 - 25^\circ\text{C}$  ниже, чем переход В2-В1. Однако если переход В2-В1 произошел не полностью и часть вещества образца имеет структуру В2, то при понижении температуры переход В1-В2 проходит при той же температуре, что и В2-В1. Еще одной особенностью, заслуживающей внимание при анализе данного перехода, является то, что после циклирования образца через точку перехода большинство образцов возвращается к исходной форме. Таким образом, эксперимент, по-видимому, говорит о деформационном характере перехода.

Рассмотрим механизм перехода, основанный на сдвиговой деформации, не противоречащий указанным выше экспериментальным фактам. На рис. 1, в изображено соответствующее изменение структуры кристал-

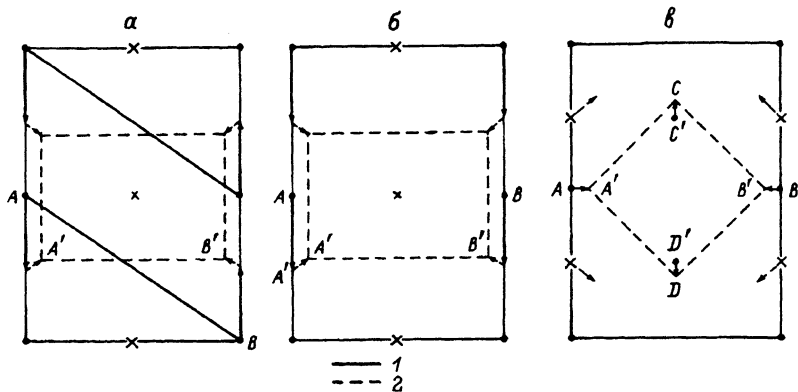


Рис. 2. Сечения элементарной ячейки структуры В1 при переходе в CsCl. а —  $(0\bar{1}1)B1$  для механизма Ватанабе, б —  $(0\bar{1}1)B1$  для механизма сдвиговой деформации, в —  $(011)B1$ . 1 — сечение элементарной ячейки структуры В1, 2 — сечение элементарной ячейки структуры В2 при той же температуре. Точками обозначены позиции ионов одного сорта, а крестиками — другого.

ла, сохраняющее расстояние между ионами. Такой механизм близок к предложенному Бюргером и соответствует искажению простого сдвига, связанному с движением плоскостей  $(100)B1$  в направлении  $[011]B1$ . Как видно из рис. 2, б, плоскости  $(001)B1$  сдвигаются в противоположных направлениях, слабо изменяя расстояние между ионами.

Проанализируем требования, налагаемые выбором механизма на симметрию системы. Тензор, отвечающий деформации простого сдвига, несимметричный. Этот тензор можно представить в виде суммы симметричного и антисимметричного тензоров соответственно, искажения деформации чистого сдвига и поворота системы как целое

$$\xi_{ik} = \varepsilon_{ik} + \chi_{ik}.$$

Следовательно, чтобы совместить систему, искаженную деформацией простого сдвига, с системой, искаженной деформацией чистого сдвига, необходимо повернуть систему как целое. В случае простого сдвига плоскостей  $(100)$  в направлении  $[010]$  (рис. 3)  $\xi_{ik}$  имеет все нулевые компоненты, кроме  $\xi_{xy}$ , а в  $\varepsilon_{ik}$  и  $\chi_{ik}$  отличны от нуля только компоненты

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \chi_{xy} = -\chi_{yx} = \text{tg } \alpha/2 \approx \alpha/2.$$

Таким образом, если предложенный механизм верен, то низкосимметричная фаза при малой деформации должна быть инвариантна одновременно относительно деформации чистого сдвига и вектора поворота. В данном случае таким требованиям при малых деформациях отвечает решение уравнения состояния  $\eta_1 = \eta_2, \eta_3$ . Симметрия соответствующей низкосимметричной фазы будет  $C_{2v}^3$  [4].

Предложенный механизм отличается от механизма Ватанабе только тем, что в последнем случае плоскости сдвигаются в одном направлении, а не в противоположных. Сечения  $(011)B1$  для механизмов [7] и предложенного здесь совпадают и полностью согласуются с данными по расширению кристалла вдоль направления  $[100]B1$  в эксперименте, описанном в [7].

Рассмотрим теперь переход другого типа в галоидах K и Rb (кроме RbF). Монокристаллы KCl, в частности, испытывающие превращения в обоих направлениях, в основном сохраняют прозрачность, первоначальную форму и детали структуры поверхности. А для фазового превращения, когда средой, передающей давление, служит не жидкость, а свинец, кубический образец приближается к ромбоэдрической форме. Случаи появления остаточной макроскопической деформации наблюдались также при резком сбросе давления из области существования фазы B2 [1].

Ориентационные соотношения для этого типа перехода описаны в [8]

$$(100)B1 \parallel (111)B2; \quad (111)B1 \parallel (100)B2.$$

В статье [8] не обсуждался механизм перехода, а только указывалось, что направление смещения атомов будет отличаться от направлений смещений, следующих из механизма Бюргера. В галоидах K и Rb реализуется другой тип деформации сдвига — сдвигаются слои (111)B1 в направлении [211]B1 (рис. 1, 2). Однако переход B1-B2 здесь также можно описывать как деформацию простого сдвига плоскостей (111)B1 в направлении [211]B1. Таким образом, при малых искажениях структур, так же как и в CsCl, в галоидах K и Rb будет образовываться фаза с симметрией  $C_{2v}^3$ .

## 2. Феноменологическое описание перехода

Как известно, в феноменологической теории Ландау при переходе рассматривается изменение зарядовой плотности

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho,$$

где

$$\delta\rho = \sum_{\alpha} \sum_i f_i(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \sum_i \eta_i \varphi_i(\mathbf{r}),$$

$f_i(\mathbf{r})$  — функции, переходящие друг в друга под действием операций пространственной группы. Эти функции преобразуются по неприводимым представлениям, ответственным за переход [17]. Далее для анализа изменений при реконструктивном переходе B1-B2 воспользуемся результатами решения угловой задачи теории фазовых переходов [5].

Рассмотрим изменение функции распределения зарядовой плотности в низкосимметричной фазе для заданного механизма — деформации простого сдвига (рис. 3). Если предложенный механизм верен, то функции  $f_i(\mathbf{r})$  можно выбрать так, чтобы они преобразовывались как недиагональные компоненты тензора деформации по представлению  $\tau_7$ ,  $K = 0$ ,  $O_h$ . При смещении слоев относительно друг друга на величину  $q$  (рис. 3) функция распределения должна меняться периодически, так как структуры при сдвиге на величину  $q + na_1/2$  эквивалентны для любого целого  $n$ . (Для удобства дальнейшего изложения введем безразмерную величину сдвига  $\gamma = 4\pi q/a_1$ ). Относительный сдвиг слоев кристалла на произвольную величину  $\gamma$  вдоль оси  $a_1$  можно рассматривать как операцию.

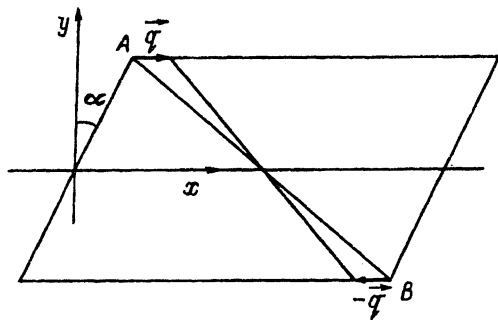


Рис. 3. Изменение ячейки под действием деформации простого сдвига. Смещаются плоскости (100) в направлении (010).

В этом случае все возможные сдвиги вдоль оси  $a_1$  образуют непрерывную группу. Неприводимые представления этой циклической группы имеют вид  $\exp\{im\gamma\}$ , где  $m$  — целая величина, нумерующая представление.

Деформация сдвига сохраняет симметрию  $\delta\rho$ , а следовательно, низкосимметричная фаза остается инвариантной по отношению к операциям рассматриваемой непрерывной группы. Произвольную деформацию сдвига можно представить в виде разложения по сдвигам, направленным вдоль исходных трансляций. Рассмотрим сначала преобразования, которые соответствуют искажению  $\varepsilon_{xy}$ .

На рис. 3 изображена одна ячейка кристалла. Искажения любой другой ячейки можно представить в виде суперпозиции смещения ячейки как целого и деформации, изображенной на этом рисунке. Точки  $A$  и  $B$  в исходном состоянии связаны трансляцией. Рассмотрим дальнейшее искажение как возникновение вектора деформации сдвига в точке  $A$ . Тогда для функции зарядовой плотности будет справедливо разложение по неприводимым представлениям непрерывной группы сдвига в окрестности точки  $A$  (рис. 3)

$$\delta\rho = \sum_m (\delta\rho)_m \exp\{im(\gamma - \gamma_0)\},$$

$$(\delta\rho)_m = \int_0^{2\pi} \delta\rho \exp\{im(\gamma - \gamma_0)\} d\gamma. \quad (1)$$

Из всех преобразований, сохраняющих искажение  $\varepsilon_{xy}$ ; достаточно рассмотреть преобразования, отвечающие ядру гомоморфизма  $L$ -группы [6]. В данном случае — это тождественное преобразование и инверсия. Таким образом, получим

$$\begin{aligned} \delta\rho(r, \gamma) &= \delta\rho_A(r, \gamma) + \delta\rho_B(r, -\gamma) = \\ &= \sum_m ((\delta\rho_A)_m \exp\{im(\gamma - \gamma_0)\} + (\delta\rho_B)_m \exp\{-im(\gamma - \gamma_0)\}). \end{aligned}$$

Можно показать, что коэффициенты  $(\delta\rho_A)_m$  и  $(\delta\rho_B)_m$  в разложении (1) в окрестностях точек  $A$  и  $B$ , совпадающие при  $\gamma = 0$ , остаются совпада-

ющими при других значениях  $\gamma$ . Тогда можно записать

$$\delta\rho = \sum_m (\delta\rho_A)_m \cos(m\gamma) = \sum_m (\delta\rho)_m \cos(m\gamma).$$

Запишем теперь явно индекс функции, по которому преобразуется  $\delta\rho$  (1 соответствует  $\varepsilon_{xy}$ , 2 —  $\varepsilon_{xz}$ , 3 —  $\varepsilon_{yz}$ )

$$\delta\rho^{(1)} = \sum_{m_1} \delta\rho_{m_1}^{(1)} \cos(m_1(\gamma_1 - \gamma_{10})).$$

Рассматривая все возможные преобразования пространственной группы, получим, что  $\delta\rho^{(1)}$  переходит в функции  $\delta\rho^{(2)}$  и  $\delta\rho^{(3)}$ , а  $\gamma^{(1)}$  — в  $\gamma^{(2)}$  и  $\gamma^{(3)}$  либо остается неизменной. Таким образом, для функции  $\delta\rho$  следует записать

$$\begin{aligned} \delta\rho = & \sum_{m_1} \delta\rho_{m_1}^{(1)} \cos(m_1(\gamma_1 - \gamma_{10})) + \\ & + \sum_{m_2} \delta\rho_{m_2}^{(2)} \cos(m_2(\gamma_2 - \gamma_{20})) + \sum_{m_3} \delta\rho_{m_3}^{(3)} \cos(m_3(\gamma_3 - \gamma_{30})). \end{aligned}$$

Потребуем, чтобы функция  $\delta\rho^{(1)}$  обращалась в нуль и достигала экстремума с периодом  $\pi a_1/2$  по  $\gamma_1$ , тогда все  $m_1$ , кроме  $m_1 = 1$ , должны обращаться в нуль. Аналогичные требования накладываются на  $\delta\rho^{(2)}$  и  $\delta\rho^{(3)}$ . Выбирая  $\gamma_0 = \pi/2$ , получим окончательно

$$\delta\rho = \sin(\gamma_1) \left\{ \delta\rho_1^{(1)} \right\} + \sin(\gamma_2) \left\{ \delta\rho_1^{(2)} \right\} + \sin(\gamma_3) \left\{ \delta\rho_1^{(3)} \right\}. \quad (2)$$

Теперь, если в (2), следуя [17], выделить функции, зависящие только от координат и не зависящие от микроскопического параметра порядка  $\gamma$  (в выражении (2) они выделены фигурными скобками), то, сравнивая с [17], получим, что параметр порядка Ландау будет иметь вид

$$\eta_1 = \sin(\gamma_1), \quad \eta_2 = \sin(\gamma_2), \quad \eta_3 = \sin(\gamma_3).$$

Соответственно инварианты для данного перехода следующие:

$$I_1 = \sin^2(\gamma_1) + \sin^2(\gamma_2) + \sin^2(\gamma_3),$$

$$I_2 = \sin(\gamma_1) \sin(\gamma_2) \sin(\gamma_3),$$

$$I_3 = \sin^4(\gamma_1) + \sin^4(\gamma_2) + \sin^4(\gamma_3). \quad (3)$$

Для анализа фазовой диаграммы рассмотрим канонический потенциал (представляющий собой полином по первым и вторым степеням инвариантов), который отражает все особенности фазовой диаграммы, следующие из симметрии системы [18]. Как было показано в [10], термодинамический потенциал необходимо минимизировать по  $\gamma$

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} = \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \frac{\partial\eta}{\partial\gamma}.$$



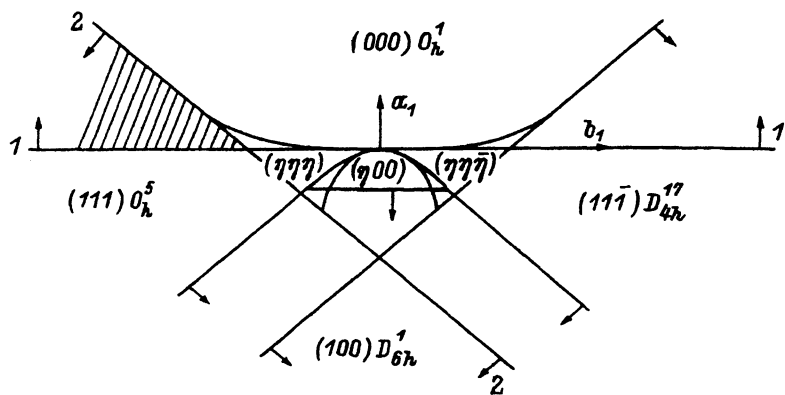


Рис. 4. Фазовая диаграмма для переходов В1-В2 в щелочно-галогидных кристаллах. Заштрихована область гистерезиса перехода В1-В2, соответствующая экспериментальным Т-Р диаграммам, приведенным в [2]. 1 — граница устойчивости фазы (000), 2 — граница устойчивости фазы (111). Указаны также линии устойчивости для фаз (111̄), (ηηη), (ηηη̄), (100), (η00).

Параметр порядка Ландау в данном случае ограничен,  $|\eta| \leq 1$ . Решению уравнения состояния  $\partial\eta/\partial\gamma = \cos(\gamma) = 0$  соответствует  $|\gamma| = 1$ , что выражается в появлении новых элементов симметрии кристалла. Фазу, соответствующую такому решению, принято называть предельной [10].

Фазовая диаграмма для инвариантов (3) для случая малых  $\gamma$  впервые была рассмотрена в [5]. Каноническая фазовая диаграмма для малых  $\eta$  была построена в [18]. Кроме перечисленных в [5, 18] решений, существует еще шесть предельных фаз: (111), соответствующая (при равенстве длин минимальных трансляций) пространственной группе  $O_h^5$ , (111̄) —  $D_{4h}^{17}$ , (100) —  $D_{6h}^1$ , а также фазы (1ηη), (1η), (1η<sub>1</sub>η<sub>2</sub>). На рис. 4 представлены линии устойчивости нульпараметрических фаз (000), (111) и (111̄), (100). Эти линии сохраняют свой вид для потенциала, представленного в виде полинома любой степени.

При анализе параметра порядка, проведенном выше, не учитывалось наличие в структуре атомов двух сортов. В модели твердых сфер с учетом малого изменения расстояний между ионами некоторые фазы, например (111̄), осуществимы только при вытеснении ионов другого сорта в соседние поры. Однако переход между структурами В1-В2 подчиняется указанным выше предположениям. Область гистерезиса этого перехода заштрихована на рис. 4. Для анализа конкретных переходов и возможности появления новых фаз необходимо из всего пространства фазовой диаграммы выделить подпространство, отвечающее разрешенным решениям. Так, механизму перехода В1-В2 Бюргера будет отвечать равенство  $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3$ . Механизму, предложенному здесь для CsCl и галогидов К и Rb, отвечает равенство двух компонент  $\eta_1 = \eta_2, \eta_3$ . Сравнение участка диаграммы (рис. 4) с экспериментальными фазовыми диаграммами, приведенными в [2], указывает на качественное совпадение результатов.

## Список литературы

- [1] Лившиц Л.Д., Рябинин Ю.Н., Ларионов Л.В., Зверев А.С. // ЖЭТФ. 1968. Т. 55. № 4. С. 1173-1185.
- [2] Петрунина Т.И., Сошников В.И., Эстрин Э.Н. // Кристаллография. 1972. Т. 17. № 2. С. 423-425.
- [3] Вальковский С.Н., Ерофеев В.Н., Пересада Е.Г., Понятовский Е.Г. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 2. С. 360-364.
- [4] Сахненко В.П., Таланов В.М. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 3. С. 785-792.
- [5] Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982. 304 с.
- [6] Buerger M.J. // Phase Transformations in Solids / Ed. R. Smolucrowski. N.Y.-L., 1951. P. 183.
- [7] Watanabe M., Tokonami M., Morimoto N. // Acta Cryst. 1977. V. A33. N 2. P. 360-364.
- [8] Okai B. // J. Phys. Soc. Japan. V. 50. N 10. P. 3189.
- [9] Базаров И.П., Геворкян Э.В., Сактаганов М.Ж. // ЖФХ. 1990. Т. 64. № 2. С. 1920-1924.
- [10] Гуфан Ю.М., Дмитриев В.П., Толедано П. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 4. С. 1057-1064.
- [11] Dmitriev V.P., Rochal S.B., Gufan Yu.M., Toledano P. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. N 19. P. 1958-1961.
- [12] Dmitriev V.P., Gufan Yu.M., Toledano P. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. N 14. P. 7248-7255.
- [13] Dmitriev V.P., Rochal S.B., Gufan Yu.M., Toledano P. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. N 21. P. 2495-2498.
- [14] Chatterji S., Mackey A.L., Jeffery J.W. // J. Appl. Cryst. 1971. V. 4. N 2. P. 175.
- [15] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. С. 128.
- [16] Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 368 с.
- [17] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. Серия "Теоретическая физика". Т. 5. М., 1976. 586 с.
- [18] Кутын Е.И. // Автореф. канд. дис. Ростов н/Д., 1988.

Северо-Кавказский  
научный центр  
высшей школы  
Ростов-на-Дону

Поступило в Редакцию  
14 декабря 1992 г.