

УДК 584:539.26

©1994

## ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ И СТАТИЧЕСКИЕ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ ГЕКСАБОРИДОВ НЕОДИМА И САМАРИЯ

*В.А. Трунов, А.Л. Малышев, Д.Ю. Чернышов,  
М.М. Корсукова, В.Н. Гурин*

Методом порошковой нейтронной дифракции высокого разрешения впервые проведены исследования кристаллической структуры  $Nd^{11}B_6$  и  $^{154}Sm^{11}B_6$  в области температур 23–300 К с целью сравнения структурных параметров атомов и их изменения с температурой в обоих гексаборидах. Обнаружено, что тепловые колебания промежуточно-валентного иона  $Sm^{+2.6}$  и иона  $Nd^{+3}$  с целочисленной валентностью удовлетворительно описываются в рамках модели Эйнштейна с характеристической температурой 120 К во всем температурном диапазоне. В обоих соединениях наблюдались характерные особенности в температурной зависимости анизотропных тепловых факторов атомов бора. Показано, что для обоих гексаборидов  $Nd^{11}B_6$  и  $^{154}Sm^{11}B_6$  температурные зависимости среднеквадратичных смещений атомов бора могут быть описаны с помощью модели Дебая при введении статических смещений атомов бора.

Гексабориды редкоземельных элементов (РЗЭ) обнаруживают широкий диапазон интересных физических свойств [1]. В последние годы предметом интенсивных исследований является гексаборид самария, относящийся к классу полупроводниковых соединений с промежуточной валентностью [2–4]. Все наблюдаемые аномалии физических свойств  $SmB_6$  связывают с промежуточной валентностью ионов самария. Исследование поведения структурных параметров атомов в соединениях с промежуточной валентностью было проведено только в одной работе [5], в которой методом рентгеноструктурного анализа монокристалла  $Sm_{0.7}Y_{0.3}S$  обнаружена аномальная температурная зависимость фактора Дебая–Валлера для атома серы, которую авторы этой работы объясняют взаимодействием флюкутирующей валентности ионов самария с оптическими фононами. Что касается исследований температурной зависимости структурных параметров атомов в гексаборидах РЗЭ, нам известна только одна работа [6], в которой проведено уточнение кристаллической структуры монокристалла  $CeB_6$  при 300 и 100 К методом рентгеновской дифракции.

Гексабориды самария и неодима, как и других РЗЭ, кристаллизуются в простой кубической решетке типа  $CaB_6$  [7] в которой ионы РЗЭ располагаются в вершинах кубической ячейки, а октаэдр из атомов бора — в ее центре. В соединении  $Nd^{11}B_6$  ионы  $Nd(4f^3)$  находятся в состоянии с целочисленной (+3) валентностью [8].  $Nd^{11}B_6$  является ана-

логом одновалентного металла. Ранее нами были проведены исследования [9,10] температурных зависимостей структурных параметров атомов в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  методом порошковой нейтронной дифракции высокого разрешения в интервале температур от 20 до 300 К. Некоторые особенности полученных температурных зависимостей среднеквадратичных смещений атомов в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  были отнесены за счет проявления промежуточной валентности ионов самария в данном соединении. Предпринятые нами в данной работе тем же методом в указанном диапазоне температур исследования температурных зависимостей структурных параметров атомов в соединении  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  преследовали две основные цели. Во-первых, получение упомянутых зависимостей в гексабориде неодима, данные о которых в литературе отсутствуют. Во-вторых, попытаться прояснить влияние переменной валентности ионов Sm на изменение структурных параметров атомов в металлической и борсой подрешетках сравнением полученных зависимостей для гексаборидов самария и неодима.

## 1. Экспериментальная часть

Методика порошковых нейтронно-дифракционных исследований подробно описана ранее для  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  [9–11]. Образцы  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  были получены в виде монокристаллов раствор–расплавным методом из алюминия в качестве растворителя [12]. Степень обогащения исходного бора изотопом  $^{11}\text{B}$  составляла 99.3%, чистота исходных компонентов (бора и неодима) составляла 95 и 99 mass% соответственно. Для проведения нейтронного эксперимента использовались размолотые в мелкодисперсный порошок монокристаллы в количестве 10 g. Исследование кристаллической структуры проводилось на времязпролетном нейтронном дифрактометре высокого разрешения «Мини-СФИНКС» [13]. Для задания температуры на образце в диапазоне 23–300 К использовался криогенератор RG210 фирмы «Leybold-Heraeus». Стабильность температуры поддерживалась в пределах 3°, градиент температуры на образце высотой 3 см не превышал 0.5 K/cm. Время измерений при каждой температуре 10 h. Полнопрофильный анализ спектров проводился модифицированным методом Ритвельда [14] с использованием значений амплитуд упругого когерентного рассеяния нейтронов ядрами элементов из [15] и учетом степени обогащения изотопом  $^{11}\text{B}$ . Вводились поправки на поглощение [15] и первичную экстинкцию [16]. Обработка спектров проводилась в изотропном приближении для температурного фактора атома неодима и в анизотропном приближении для атома бора. В процессе уточнения структуры варьировались следующие параметры: период решетки, позиционный параметр атома бора, заселенность позиции бора, температурные факторы атомов, параметры полуширин пиков, фоновые параметры, масштабный фактор, эффективный размер блока мозаики. Ввиду сильной корреляции между отдельными параметрами, например заселенностью позиции бора и его температурными факторами, использовалось поочередное уточнение таких параметров. Полнопрофильный анализ экспериментальных спектров был проведен для каждой температуры, при которой проводились измерения.

## 2. Результаты эксперимента и их обсуждение

На рис. 1 приведена зависимость постоянной решетки от температуры для  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ . Если для  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  с переменно-валентным ионом самария эта зависимость имеет гладкий минимум вблизи 150 К [9,10], то в случае  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ , как и следовало ожидать, постоянная решетки плавно уменьшается с понижением температуры.

На рис. 2 показана температурная зависимость среднеквадратичных смещений атома Nd в изотропном приближении, а на рис. 3 — полученная нами ранее [9,10] аналогичная зависимость для атома Sm в соответствующих гексаборидах. В работах [17–19] для гексаборидов различных РЗЭ был показан невзаимодействующий характер колебаний атомов РЗЭ при комнатной температуре. Этот факт дает основание использовать модель Эйнштейна с характеристической температурой  $\Theta_E$  для описания среднеквадратичных смещений атомов РЗЭ. Харак-

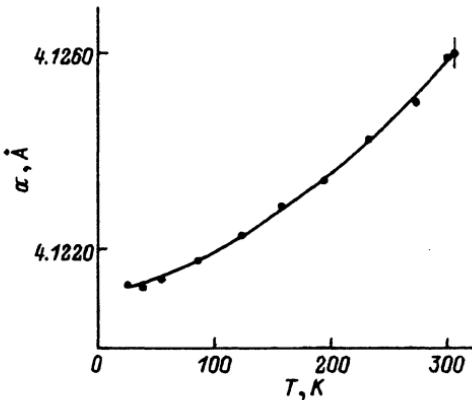


Рис. 1. Зависимость постоянной решетки  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  от температуры.

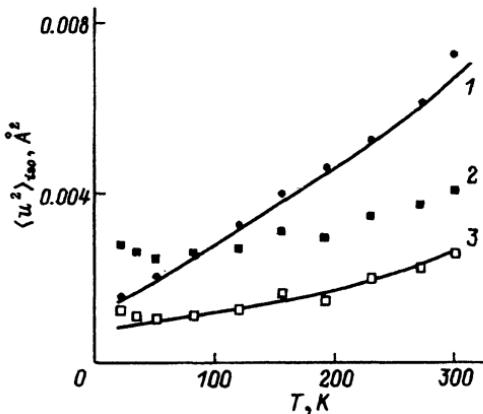


Рис. 2. Температурные зависимости изотропных тепловых параметров атомов  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ .

1 — атом Nd, сплошная кривая — расчет по модели Эйнштейна с  $\Theta_E = 120$  К; 2 — атом B, без учета статического смещения; 3 — атом B, с учетом статического смещения  $\langle u^2 \rangle_{\text{stat}} = 0.0015$  Å²; сплошная кривая — расчет по модели Дебая с  $\Theta_D = 549$  К.

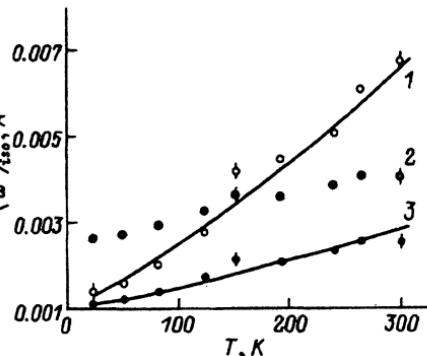


Рис. 3. Температурные зависимости изотропных тепловых параметров атомов  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ .

1 — атом Sm, сплошная кривая — расчет по модели Эйнштейна с  $\Theta_E = 120$  К; 2 — атом B, без учета статического смещения; 3 — атом B, с учетом статического смещения  $\langle u^2 \rangle_{\text{stat}} = 0.0015$  Å²; сплошная кривая — расчет по модели Дебая с  $\Theta_D = 518$  К.

теристические температуры Эйнштейна были вычислены из уравнения

$$\langle u^2 \rangle_{L_n} = \frac{h^2}{8\pi^2 m k_B \Theta_E} \frac{\exp(\Theta_E/T) + 1}{\exp(\Theta_E/T) - 1}, \quad (1)$$

где  $\langle u^2 \rangle_{L_n}$  — среднеквадратичные смещения атомов РЗЭ,  $h$  — постоянная Планка,  $m$  — масса атома РЗЭ,  $\Theta_E$  — температура Эйнштейна,  $T$  — температура измерения.

Такой подход был использован нами ранее [9,10] для описания температурного фактора атома самария в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  во всем интервале температур от 23 до 300 К. Значение характеристической температуры  $\Theta_E$  во всех температурных точках оставалось примерно постоянным и было равно 120 К. На рис. 2, 3 приведена аппроксимация температурных зависимостей среднеквадратичных смещений атомов Sm и Nd в рамках модели Эйнштейна. Значение  $\Theta_E$  для атома неодима также оказалось равным 120 К. Вполне удовлетворительное описание рассматриваемых зависимостей моделью Эйнштейна подтверждает предположение о слабом взаимодействии между борной и металлической подрешетками и в пределах металлической подрешетки в  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  и  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  во всей температурной области. Из сравнения температурных зависимостей тепловых факторов атомов Nd и Sm можно сделать вывод о том, что изменение валентности Sm с понижением температуры не оказывает влияния на тепловые колебания атомов Sm по крайней мере в пределах точности эксперимента. Кстати, то же самое наблюдается и для температурного фактора металла в переменно-валентном соединении  $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$  [15]. Отметим, что полученное в данной работе значение характеристической температуры Эйнштейна для Nd ( $\Theta_E = 120$  К) совпадает с определенным нами ранее [10] значением  $\Theta_E$  для Sm. В то же время соответствующее значение для атомов La составляет  $\Theta_E = 150$  К [19]. Еще в работе [10] нами было отмечено, что эту разницу нельзя приписать влиянию переменной валентности иона самария, как это было сделано в работе [4] исходя из смягчения акустических фононных мод в  $\text{SmB}_6$  по сравнению с  $\text{LaB}_6$ . Совпадение значений  $\Theta_E$  для Nd и Sm еще раз подтверждает как этот вывод, так и сделанное в той же работе [10] утверждение о смягчении характеристической эйнштейновской частоты колебаний атомов РЗЭ в ряду гексаборидов от La до Sm. Рассмотрение возможных причин такого смягчения будет сделано в отдельной публикации.

На рис. 4 показаны температурные зависимости анизотропных тепловых параметров атомов бора в  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ , а на рис. 5 — полученные нами ранее [9,10] аналогичные зависимости в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ . Как известно [20], связи между октаэдрами и борной подрешетке короче, чем связи внутри октаэдра. Параметр  $\langle u^2 \rangle_{11}$  представляет собой среднеквадратичные смещения атомов бора в направлении связи между октаэдрами, параметр  $\langle u^2 \rangle_{22} = \langle u^2 \rangle_{33}$  — в направлении, перпендикулярном этой связи. Как видно из рис. 4, 5, для обоих соединений изменение амплитуд тепловых колебаний атомов бора с температурой относительно невелико, значения  $\langle u^2 \rangle_{11}$  и  $\langle u^2 \rangle_{22}$  плавно уменьшаются с понижением температуры, причем  $\langle u^2 \rangle_{11} \ll \langle u^2 \rangle_{22}$  во всем температурном диапазоне. Это поведение вполне отражает представление борной подрешетки в

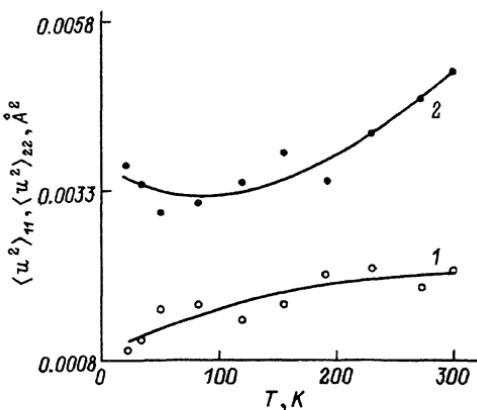


Рис. 4. Зависимость от температуры анизотропных среднеквадратичных смещений атомов бора в  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ .  
1 —  $\langle u^2 \rangle_{11}$ , 2 —  $\langle u^2 \rangle_{22}$ .

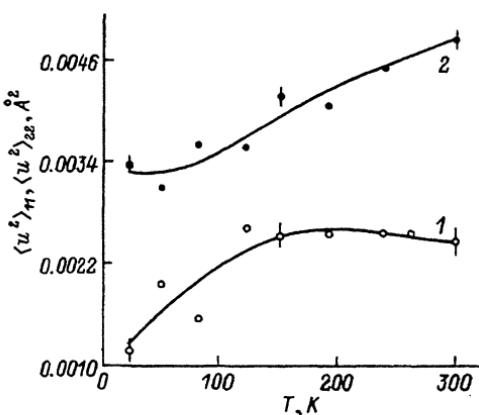


Рис. 5. Зависимость от температуры анизотропных среднеквадратичных смещений атомов бора в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ .  
1 —  $\langle u^2 \rangle_{11}$ , 2 —  $\langle u^2 \rangle_{22}$ .

виде жестко связанного каркаса борных октаэдров. В работе [10] нами была сделана попытка оценить «рыхлость» борного каркаса, используя температурную зависимость отношения  $\langle u^2 \rangle_{22}/\langle u^2 \rangle_{11}$ . На рис. 6 и 7 приведены зависимости от температуры величины  $\langle u^2 \rangle_{22}/\langle u^2 \rangle_{11}$  для  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  и  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  соответственно. В обоих случаях наблюдается заметное увеличение значений  $\langle u^2 \rangle_{22}/\langle u^2 \rangle_{11}$  примерно на одинаковую величину в низкотемпературной области. Таким образом, с понижением температуры анизотропия колебаний атомов бора увеличивается. Причины этого пока остаются неясными, однако из сравнения температурных зависимостей (рис. 6, 7) можно сделать вывод, что увеличение отношения  $\langle u^2 \rangle_{22}/\langle u^2 \rangle_{11}$  при низких температурах в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  нельзя объяснить влиянием только переменно-валентного иона самария.

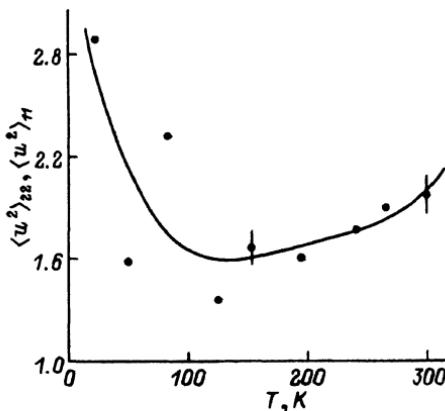


Рис. 6. Температурная зависимость отношения  $\langle u^2 \rangle_{11}/\langle u^2 \rangle_{22}$  анизотропных среднеквадратичных смещений атомов бора в  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ .

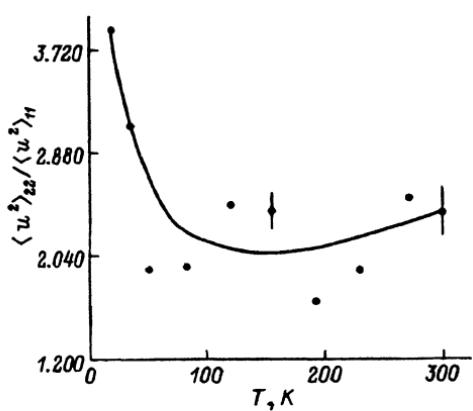


Рис. 7. Температурная зависимость отношения  $\langle u^2 \rangle_{22}/\langle u^2 \rangle_{11}$  анизотропных среднеквадратичных смещений атомов бора в  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ .

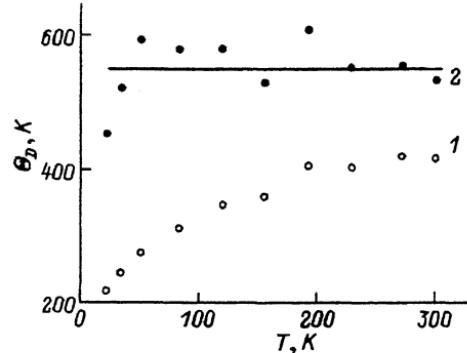


Рис. 8. Зависимость от температуры эффективной температуры Дебая  $\Theta_D$  для борной подрешетки в  $Nd^{11}B_6$ .

1 — без учета статического смещения; 2 — с учетом статического смещения  $\langle u^2 \rangle_{stat} = 0.0015 \text{ \AA}^2$ , среднее значение  $\Theta_D = 549 \text{ K}$ .

Для описания температурной зависимости тепловых колебаний атомов бора было использовано приближение Дебая

$$\langle u^2 \rangle_{iso} = \frac{3h^2T}{k_B m \Theta_D} \left( d\left(\frac{\Theta_D}{T}\right) + 0.25 \frac{\Theta_D}{T} \right), \quad (2)$$

где  $h$ ,  $k_B$  — постоянные Планка и Больцмана;  $T$  — температура;  $m$  — атомная масса;  $\Theta_D$  — температура Дебая;  $d(\Theta_D/T)$  — функция Дебая;  $\langle u^2 \rangle_{iso}$  — изотропные среднеквадратичные смещения атомов бора, пересчитанные из анизотропного приближения.

Эффективная температура Дебая рассчитывалась как корень уравнения (2) с использованием значений  $\langle u^2 \rangle_{iso}$ , определенных из экспериментальных данных при каждой температуре измерений. В предположении только динамического вклада в среднеквадратичные смещения атомов в борной подрешетке для обоих образцов  $Nd^{11}B_6$  и  $^{154}Sm^{11}B_6$  наблюдается уменьшение эффективной температуры Дебая с понижением температуры. Соответствующие зависимости представлены на рис. 8 и 9. В этом случае удовлетворительно описать температурный ход зависимостей среднеквадратичных смещений атомов бора для обоих образцов с помощью модели Дебая не удается. Следует отметить, что с понижением температуры наблюдается изменение соотношения величин тепловых факторов атомов РЗЭ и атомов бора. Как видно из рис. 2, 3, амплитуды тепловых колебаний атомов РЗЭ больше амплитуд тепловых колебаний атомов бора при температурах, превышающих 100 К для  $Nd^{11}B_6$  и 150 К для  $^{154}Sm^{11}B_6$ . Ниже этих температур тепловые факторы атомов РЗЭ становятся меньше тепловых факторов атомов бора. Так как этот факт наблюдается для обоих рассматриваемых образцов, то объяснить его наличие в  $^{154}Sm^{11}B_6$  только проявлением переменной валентности ионов самария не представляется возможным.

Ранее нами было отмечено [9–11, 21], что в ряду гексаборидов РЗЭ наблюдается полная заселенность металлической подрешетки и наличие небольшого (до 9%) количества вакансий в подрешетке бора. Для рассматриваемых образцов обнаружено 8% вакансий в бор-

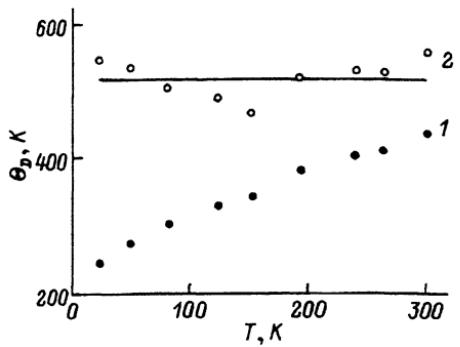


Рис. 9. Зависимость от температуры эффективной температуры Дебая  $\Theta_D$  для борной подрешетки в  $^{154}Sm^{11}B_6$ .

1 — без учета статического смещения; 2 — с учетом статического смещения  $\langle u^2 \rangle_{stat} = 0.0015 \text{ \AA}^2$ ; среднее значение  $\Theta_D = 518 \text{ K}$ .

ной подрешетке для  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  и 1% вакансий для  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$ . Вакансии, по-видимому, статистически распределены по борной подрешетке, так как в пределах точности эксперимента их упорядочения не наблюдалось. Вследствие наличия указанных вакансий естественно предположить, что температурный фактор  $\langle u^2 \rangle_{\text{iso}}$  атомов бора может быть представлен в виде суммы динамического и статического вкладов

$$\langle u^2 \rangle_{\text{iso}} = \langle u^2 \rangle_{\text{din}} + \langle u^2 \rangle_{\text{stat}},$$

где  $\langle u^2 \rangle_{\text{din}}$  определяется как корень уравнения (2);  $\langle u^2 \rangle_{\text{stat}}$  — вклад, не зависящий от температуры. Величина статической компоненты оказалась одинаковой для  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  и  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  и равной  $\langle u^2 \rangle_{\text{stat}} = 0.0015 \text{ \AA}^2$ . Температуры Дебая, определенные с учетом только динамической компоненты теплового фактора атомов бора, представлены на рис. 8 для  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  и на рис. 9 для  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$  со средними значениями 549 и 518 К соответственно. На рис. 2, 3 приведены температурные зависимости среднеквадратичных смещений атомов бора в рассматриваемых образцах с учетом статических смещений, т.е. показанные значения отражают только динамический вклад в амплитуду колебаний. Там же представлена аппроксимация полученных среднеквадратичных смещений атомов моделью Дебая с определенными выше средними значениями температуры Дебая 549 К для  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  и 518 К для  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ . Как видно из этих рисунков, во-первых, аппроксимация в рамках модели Дебая динамического вклада в тепловой фактор атомов бора для обоих образцов является вполне удовлетворительной, во-вторых, с введением статических смещений атомов в борной подрешетке исчезает необычное изменение соотношения среднеквадратичных смещений атомов РЗЭ и атомов бора с понижением температуры.

Таким образом, в результате проведенной работы можно сделать следующие выводы.

1. В области температур 20–300 К изменение валентности иона самария не оказывает влияния на температурную зависимость теплового фактора атомов самария. Температурные зависимости среднеквадратичных смещений атомов РЗЭ удовлетворительно описываются моделью Эйнштейна с  $\Theta_E = 120$  К для  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  и  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ .

2. Увеличение отношения  $\langle u^2 \rangle_{22} / \langle u^2 \rangle_{11}$  при понижении температуры наблюдается в обоих гексаборидах и свидетельствует о том, что увеличение анизотропии колебаний атомов бора в области низких температур не зависит от изменения валентности иона самария и является, возможно, общим свойством для всего ряда гексаборидов РЗЭ.

3. С введением статических смещений температурные зависимости среднеквадратичных смещений атомов бора удовлетворительно описываются с помощью простой модели Дебая в  $\text{Nd}^{11}\text{B}_6$  и  $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$ .

4. Для обоих образцов во всем диапазоне температур 20–300 К динамическая часть среднеквадратичных смещений атомов бора не превышает величины среднеквадратичных смещений атомов РЗЭ.

5. Наличие статических смещений в рассматриваемых гексаборидах обусловлено, по всей видимости, существованием вакансий в борной подрешетке. В подтверждение этому можно привести факт обнаружения статических смещений атомов в образцах нестехиометрического состава карбидов переходных металлов [22, 23].

### Список литературы

- [1] Etourneau J., Hagenmuller P. // Phil. Mag. 1985. V. B52. P. 589–610.
- [2] Kasuya T., Kasaya M., Takegahara K., Fujita T., Goto T., Tamaki A., Takigawa M., Yasuoka H. // J. Magn. Magn. Mater. 1983. V. 31–34. P. 447–454.
- [3] Alekseev P.A., Konovalova E.S., Lasukov V.N., Lukshina S.N., Paderno Yu.B., Sadikov I.P., Gorvenko E.V. // Sov. Phys. Solid State. 1988. V. 30. P. 2024–2035.
- [4] Alekseev P.A., Ivanov A.S., Dorner B., Schober H., Kikoin K.A., Mishchenko A.S., Lasukov V.N., Konovalova E.S., Paderno Yu.B., Rumyantsev A.Yu., Sadikov I.P. // Europhys. Lett. 1989. V. 10. P. 457–463.
- [5] Dernier P., Weber W., Longinotti L.D. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. P. 3635–3643.
- [6] Sato S. // J. Magn. Magn. Mater. 1985. V. 52. P. 310–312.
- [7] Stackelberg M., Neumann F. // Z. Phys. Chem. 1932. V. 19. P. 314–320.
- [8] Grushko Yu.S., Paderno Yu.B., Mishin K.Ya., Molkanov L.I., Shadina G.A., Konovalova E.S., Dudnik E.M. // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. V. 128. P. 591–570.
- [9] Трунов В.А., Малышев А.П., Чернышов Д.Ю., Корсукова М.М., Гурин В.Н. // Препринт ЛИЯФ АН СССР. 1991. № 1757. С. 16.
- [10] Trounov V.A., Malyshev A.L., Chernyshov D.Yu., Korsukova M.M., Gurin V.N., Aslanov L.A., Chernyshov V.V. // J. Phys. Condens. Matter. 1993. V. 5. P. 2479–2488.
- [11] Trunov V.A., Malyshev A.L., Chernyshov D.Yu., Kurbakov A.I., Korsukova M.M., Gurin V.N., Aslanov L.A., Chernyshov V.V. // J. Appl. Cryst. 1991. V. 24. P. 888–892.
- [12] Korsukova M.M., Stepanov N.N., Gontcharova E.V., Gurin V.N., Nikanorov S.P., Smirnov I.A. // J. Less.-Common Met. 1981. V. 82. P. 211–217.
- [13] Antson O., Bulkin A.P., Hiismaki P.E., Korotkova T.K., Kudryashev V.A., Kukkonen H.S., Muratov V.G., Poyry H.O., Shchebetov A.F., Tiitta A.T., Trunov V.A., Ul'yanov V.A. // Physica B. 1989. V. 156–157. P. 567–570.
- [14] Zlokazov V.B., Chernyshev V.V. // J. Appl. Cryst. 1992. V. 25. P. 447–451.
- [15] Rouse K.D., Cooper M.J., York E.J., Chakera A. // Acta Cryst. 1970. V. A30. P. 682–691.
- [16] Becker P., Coppens P. // Acta Cryst. 1974. V. A30. P. 129–147.
- [17] Shell G., Winter H., Reitschell H., Gompf F. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. N 3. P. 1589–1599.
- [18] Smith H.G., Dolling G., Kunii S., Kasaya M., Goto T., Lui B., Takegahara K., Kasuya T. // Solid State Commun. 1985. V. 53. P. 15–19.
- [19] Peysson Y., Daudin B., Dubus M., Benenson R.E. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 12. P. 8367–8371.
- [20] Korsukova M.M., Lundstrom T., Gurin V.N., Tergenius L.-E. // Z. Kristallogr. 1984. V. 168. P. 299–306.
- [21] Trunov V.A., Malyshev A.L., Chernyshov D.Yu., Kurbakov A.I., Korsukova M.M., Gurin V.N., Antson O., Hiismaki P. // J. Appl. Cryst. 1991. V. 24. P. 142–145.
- [22] Capkova P., Kuzel R., Sedivy J. // Phys. Stat. Sol. (a). 1983. V. 76. P. 383–390.
- [23] Dunand A., Flack H.D., Yvon K. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 4. P. 2299–2315.

С.-Петербургский институт ядерной  
физики им. Б.П. Константина РАН  
Гатчина

Поступило в Редакцию  
24 марта 1994 г.