Вычисление из первых принципов сверхтонких полей на лигандах во фторидах

© О.А. Аникеенок

Казанский государственный университет,
420008 Казань, Россия

E-mail: falin@kfti.knc.ru

(Поступила в Редакцию 12 августа 2002 г.)

Представление решетки системой взаимодействующих ионов широко используется в физике твердого тела. При этом предполагается, что волновые функции отдельных ионов являются достаточно хорошим нулевым приближением для расчета из первых принципов матричных элементов гамильтониана взаимодействия электронов и ядер решетки. Для проведения подобных расчетов в базисе таких функций предлагается использовать метод вторичного квантования. В качестве примера оценивается амплитуда перехода электрона с лиганда на центральный ион. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментом.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 02-02-16648).

Лигандные сверхтонкие взаимодействия в ионных кристаллах интенсивно исследуются методами ЯМР и ДЭЯР, так как локальные поля на ядрах ионов значительно отличаются от диполь-дипольных и могут дать обширную информацию об электронной структуре кристалла (см., например, [1,2]). Для ионов группы железа природа возникновения этих полей в основном была достаточно хорошо понята [3]. Однако простой перенос механизмов их возникновения на редкоземельные ионы приводит к противоречию с экспериментальными данными [4,5].

Несколько позднее накопившийся экспериментальный материал позволил предложить модель примесного редкоземельного центра [6]. В ней наряду с эффектами перекрывания и ковалентности $4f$-оболочки учитывались процессы виртуального переноса заряда с лиганда на $5d$-оболочку, процессы раскомпенсации $5s$- и $5p$-оболочек. Учет ковалентной связи, проводимый обычно методом молекулярных орбиталей [3], эквивалентен в методе конфигурационного взаимодействия учету во втором порядке теории возмущений процессов переноса заряда с лиганда на центральный ион [7,8]. Однако появляющиеся в этих подходах так называемые параметры ковалентности [3,6] остаются подгоночными параметрами [1,2,9], порядок которых определяется величиной соответствующего интеграла перекрывания. Получение для них микроскопических выражений исходя из первых принципов наталкивается на трудности, связанные с вычислением матричных элементов операторов на слэтеровских детерминатах, составленных из частично неортогональных орбиталей.

В [10,11] был найден вторично-квантованный вид операторов, позволяющий вычислять матричные элементы на таких детерминантах с точностью до квадратов интегралов перекрывания. Именно эта техника с использованием приложений метода вторичного квантования к атомной спектроскопии [12] позволила учесть виртуальные процессы переноса заряда выше второго порядка теории возмущений [6,8]. Однако каких-либо микроскопических выражений для оценки величины параметров ковалентности в этих работах получено не было. Кроме того, в ряде важных задач в рамках развиваемого подхода отличные от нуля вклады возникают только в четвертом порядке теории возмущений, и для корректной количественной оценки необходимо вычислять матричные элементы как минимум с точностью до четвертой степени интегралов перекрывания. Такая ситуация возникает, например, при вычислении сверхтонких полей на ядрах ионов второй координационной сферы от выделенного иона [13,14] или параметров суперобменной связи [15,16].

В данной работе на основе результатов [17] построен базис многоэлектронных ортонормированных функций и в этом базисе найден вторично-квантованный вид одночастичного и двухчастичного операторов с произвольной степенью точности по интегралам перекрывания. В качестве примера оценивается амплитуда перехода электрона с $2s$-оболочки фтора на $4f$-оболочку примесного редкоземельного иона Yb^{3+} в $KMgF_3$.

1. Теория

Рассмотрим систему, состоящую из произвольного числа ионов. Индексами $\xi, \xi', \eta, \eta', \ldots$ обозначим положение ионов и квантовые числа орбиталей ионов, т.е. $\xi = (\mathbf{R}_i, nlm_lm_s)$. Тогда некоторому распределению электронов в системе можно сопоставить детерминант $\Phi_{\{\xi\}}$, где $\{\xi\} = \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n$ — набор квантовых чисел, определяющих это распределение. Матричный элемент произвольного оператора на функциях $\Phi_{\{\xi\}}$

может быть вычислен по формулам [17]

$$\langle \Phi_{\{\xi'\}}|H|\Phi_{\{\xi\}}\rangle = \Big\langle 0\Big|\prod_{\xi'} a_{\xi'} \times H_\Phi \times \prod_{\xi} a_\xi^+\Big|0\Big\rangle$$

$$\equiv \langle \{\xi'\}|H_\Phi|\{\xi\}\rangle, \qquad (1)$$

$$H_\Phi = N\Big\{\exp\Big[\sum_{\eta\neq\eta'} a_\eta^+ a_{\eta'}\langle\eta|\eta'\rangle\Big]H\Big\}, \qquad (2)$$

$$H = \sum a_\xi^+ a_{\xi'}\langle\xi|h|\xi'\rangle + \frac{1}{2}\sum a_\xi^+ a_\eta^+ a_{\eta'} a_{\xi'}\langle\xi\eta|g|\xi'\eta'\rangle, \quad (3)$$

$$\big|\{\xi\}\big\rangle = \prod_\xi a_\xi^+|\,0\rangle, \qquad (4)$$

где h и g — одночастичный и двухчастичный операторы соответственно, $a_\xi^+(a_{\xi'})$ — оператор рождения (уничтожения) электронов, удовлетворяющий фермионным коммутационным соотношениям

$$a_\xi a_{\xi'} + a_{\xi'} a_\xi = a_\xi^+ a_{\xi'}^+ + a_{\xi'}^+ a_\xi^+ = 0,$$

$$a_{\xi'} a_\xi^+ + a_\xi^+ a_{\xi'} = \delta_{\xi\xi'}, \qquad (5)$$

N — знак нормального произведения, $\langle\eta|\eta'\rangle$ — интеграл перекрывания орбиталей. Отметим, что разложение выражения (2) в ряд с точностью до квадратов интегралов перекрывания дает все операторы, полученные в [10,11]. Если положить в (1) $H = I$ (где I — единичный оператор), получим интеграл перекрывания между детерминантами $\Phi_{\{\xi\}}$; тогда выражение (2) может быть представлено в виде [17]

$$I_\Phi = N\Big\{\exp\Big[\sum_{\eta\neq\eta'} a_\eta^+ a_{\eta'}\langle\eta|\eta'\rangle\Big]\Big\} = \exp(Q), \qquad (6)$$

$$Q = \sum a_\eta^+ a_{\eta'} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n}\langle\eta|S^n|\eta'\rangle, \qquad (7)$$

где $\langle\xi|S|\xi'\rangle \equiv \langle\xi|\xi'\rangle$ — матричные элементы матрицы перекрывания S одноэлектронных орбиталей. Систему ортонормированных многоэлектронных функций $\Psi_{\{\eta\}}$ построим следующим образом:

$$\Psi_{\{\eta\}} = \sum_{\{\xi\}} \Phi_{\{\xi\}}\Big\langle\{\xi\}\Big|\exp\Big(-\frac{1}{2}Q\Big)\Big|\{\eta\}\Big\rangle, \qquad (8)$$

или в матричном виде

$$\Psi = \Phi \times \exp\Big(-\frac{1}{2}Q\Big), \qquad (9)$$

где Ψ и Φ — однострочные матрицы.

Тогда, согласно (1) и (8), матричный элемент произвольного оператора на функциях $\Psi_{\{\eta\}}$ может быть вычислен по формулам

$$\langle \Psi_{\{\eta\}}|H|\Psi_{\{\eta'\}}\rangle = \Big\langle\{\eta\}\Big|\exp\Big(-\frac{1}{2}Q\Big) \times H_\Phi \times \exp\Big(-\frac{1}{2}Q\Big)\Big|\{\eta'\}\Big\rangle. \qquad (10)$$

С учетом коммутационных соотношений (5) выражение (2) может быть представлено в виде

$$H_\Phi = N\Big\{\exp\Big[\sum_{\eta\neq\eta'} a_\eta^+ a_{\eta'}\langle\eta|\eta'\rangle\Big]H\Big\} = \exp(Q)\times\tilde{H}, \quad (11)$$

$$\tilde{H} = \sum a_\xi^+ a_{\xi'}\langle\xi|\tilde{h}|\xi'\rangle + \frac{1}{2}\sum a_\xi^+ a_\eta^+ a_{\eta'} a_{\xi'}\langle\xi\eta|\tilde{g}|\xi'\eta'\rangle, \qquad (12)$$

$$\langle\xi|\tilde{h}|\xi'\rangle = \sum\langle\xi\big|(I+S)^{-1}\big|\theta\rangle\langle\theta|h|\xi'\rangle, \qquad (13)$$

$$\langle\xi\eta|\tilde{g}|\xi'\eta'\rangle = \sum\langle\xi\big|(I+S)^{-1}\big|\theta\rangle \times\langle\eta\big|(I+S)^{-1}\big|\xi\rangle\langle\theta\xi|g|\xi'\eta'\rangle, \qquad (14)$$

где $\langle\xi|(I+S)^{-1}|\theta\rangle$ — матричный элемент матрицы, обратной матрице $(I+S)$.

Подставляя (11) в (10), получим

$$\langle \Psi_{\{\eta\}}|H|\Psi_{\{\eta'\}}\rangle = \langle\{\eta\}|H_\Psi|\{\eta'\}\rangle, \qquad (15)$$

$$H_\Psi = \exp\Big(\frac{1}{2}Q\Big)\times\tilde{H}\times\exp\Big(-\frac{1}{2}Q\Big). \qquad (16)$$

Поскольку, согласно (10), оператор H_Ψ эрмитов, (16) можно записать как

$$H_\Psi = H_\Psi^+ = \exp\Big(-\frac{1}{2}Q\Big)\times\tilde{H}\times\exp\Big(\frac{1}{2}Q\Big). \qquad (17)$$

Разлагая (16) и (17) в ряд по коммутаторам и объединяя их, для произвольного оператора H в базисе $\Psi_{\{\eta\}}$ можно получить выражение в виде ряда

$$H_\Psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\big[Q, \tilde{H}+\tilde{H}^+\big]^{(2n)}, \qquad (18)$$

где

$$\big[Q,\tilde{H}+\tilde{H}^+\big]^{(0)} = \tilde{H}+\tilde{H}^+, \quad \big[Q,\tilde{H}+\tilde{H}^+\big]^{(1)} = \big[Q,\tilde{H}+\tilde{H}^+\big],$$

$$\big[Q,\tilde{H}+\tilde{H}^+\big]^{(2)} = \big[Q,[Q,\tilde{H}+\tilde{H}^+]\big],\ldots,$$

и первые пять членов, которые дают разложение с точностью до восьмой степени интегралов перекрыва-

ния одноэлектронных орбиталей, имеют коэффициенты, равные

$$c_0 = \frac{1}{2}, \qquad c_1 = -\frac{1}{2^3 \cdot 2!} \approx -0.0625,$$

$$c_2 = \frac{5}{2^5 \cdot 4!} \approx 0.00651, \quad c_3 = -\frac{61}{2^7 \cdot 6!} \approx -0.000661,$$

$$c_4 = \frac{5 \cdot 277}{2^9 \cdot 8!} \approx 0.0000671.$$

Система ортонормированных многоэлектронных функций, которую практически всегда используют при решении спектроскопических задач в твердом теле методом конфигурационного взаимодействия, имеет вид [18]

$$\Psi = \Phi \times (I + P)^{-\frac{1}{2}}$$

$$= \Phi \times \left(I - \frac{1}{2} P + \frac{3}{8} P^2 - \frac{5}{16} P^3 + \ldots \right), \qquad (19)$$

где матричные элементы матрицы P в обозначениях данной работы имеют вид $P_{\{\xi\},\{\xi'\}} = \langle \Phi_{\{\xi\}} | \Phi_{\{\xi'\}} \rangle$, т.е. интегралов перекрывания многоэлектронных функций $\Phi_{\{\xi\}}$. Вычисление таких интегралов, как упоминалось выше, всегда проводится с точностью до квадратов интегралов перекрывания одноэлектронных орбиталей. В выражении (18) для решения проблемы неортогональности необходимо вычисление матричных элементов от функций, аргументом которых является матрица перекрывания одноэлектронных орбиталей. Вычисление таких функций в настоящее время представляет собой вполне разрешимую задачу, после решения которой сходимость ряда (18) в терминах матричных элементов от этих функций значительно лучше сходимости рядов, вычисленных на функциях (19).

2. Оценка амплитуды перехода

Виртуальные процессы переноса заряда обычно обсуждаются в терминах параметров ковалентности γ, которые, согласно [3], определяются как

$$\gamma = -\frac{\langle \varphi | h | \chi \rangle - \langle \varphi | \chi \rangle \langle \chi | h | \chi \rangle}{|\Delta_{\varphi\chi}|}, \qquad (20)$$

где $|\varphi\rangle$ — орбиталь центрального иона, $|\chi\rangle$ — лигандная орбиталь, $|\Delta_{\varphi\chi}|$ — разность энергий возбужденного и основного состояний, которая может быть оценена из энергий ионизаций (см., например, [19]). В то же время стоящая в числителе (20) величина во всех работах является параметром. Определим величину $\tilde{\gamma}$ как

$$\tilde{\gamma} = -\frac{\langle \Psi_{\{\xi\}} | H | \Psi_{\{\xi'\}} \rangle}{|\Delta_{\{\xi\},\{\xi'\}}|}, \qquad (21)$$

где $|\Psi_{\{\xi'\}}\rangle$ — основное состояние системы, $|\Psi_{\{\xi\}}\rangle$ — возбужденное состояние, которое получается из основного переходом электрона с лиганда на центральный ион. Если в операторе H, входящем в (21), ограничиться только одночастичными членами, пропорциональными перекрыванию центральный ион–лиганд, то между (21) и (20) можно установить приближенное соотношение

$$\tilde{\gamma} \approx \gamma + \frac{1}{2} s, \qquad (22)$$

где s — интеграл перекрывания одноэлектронных орбиталей, соответствующих переходу электрона.

Вычислим далее амплитуду перехода электрона с $|2s\rangle$-орбитали лиганда на $|4f0\rangle$-орбиталь иона Yb^{3+} в $KMgF_3$ с точностью, линейной по перекрыванию металл–лиганд. Подход, развитый в предыдущем разделе, согласно (18), сводит эту задачу к вычислению матричных элементов одночастичных и двухчастичных операторов в представлении вторичного квантования между состояниями, отличающимися квантовыми числами одной орбитали. Отсюда сразу получим, что амплитуда перехода $\langle \Psi_{\{\xi\}} | H | \Psi_{\{\xi'\}}$ с указанной выше точностью равна

$$\langle \Psi_{\{\xi\}} | H | \Psi_{\{\xi'\}} = \frac{1}{2} \Bigg\{ \langle 4f0 | (I+S)^{-1} | 2s \rangle \Bigg[\varepsilon_{\mathrm{HF}}^{\mathrm{Yb}^{2+}} + \varepsilon_{\mathrm{HF}}^{\mathrm{F}^-}$$

$$+ \langle 4f0 | h_{\mathrm{M}} | 4f0 \rangle + \langle 2s | h_{\mathrm{M}} | 2s \rangle - \left\langle 2s \left| \frac{1}{|\mathbf{R}_a - \bar{\mathbf{r}}|} \right| 2s \right\rangle \Bigg]$$

$$+ \left[\langle 4f0 | (I+S)^{-1} | 4f0 \rangle + \langle 2s | (I+S)^{-1} | 2s \rangle \right]$$

$$\times \left[\langle 4f0 | h_k | 2s \rangle + \langle 4f0 | h_{\mathrm{M}} | 2s \rangle - \left\langle 4f0 \left| \frac{Z'_a + 1}{|\mathbf{R}_a - \bar{\mathbf{r}}|} \right| 2s \right\rangle \right.$$

$$+ \sum_{\xi \in \{a\}} \langle 4f0, \xi | g | 2s, \xi \rangle - \left\langle 4f0 \left| \frac{Z'_b}{|\mathbf{R}_b - \bar{\mathbf{r}}|} \right| 2s \right\rangle$$

$$\left. + \sum_{\xi \in \{b\}} \langle 4f0, \xi | g | 2s, \xi \rangle - \sum_{\xi \in \{a,b\}} \langle 4f0, \xi | g | \xi, 2s \rangle \right] \Bigg\}, \qquad (23)$$

где $\varepsilon_{\mathrm{HF}}^{\mathrm{Yb}^{2+}}$ — энергия Хартри–Фока орбитали редкоземельного иона $|4f0\rangle$, а $\varepsilon_{\mathrm{HF}}^{\mathrm{F}^-}$ — орбитали лиганда $|2s\rangle$, h_k — оператор кинетической энергии, h_{M} — энергия Маделунга, Z'_a, Z'_b — числа электронов редкоземельного иона и лиганда в основном состоянии соответственно, g — оператор кулоновского взаимодействия электронов, $\{a\}$, $\{b\}$ — множества орбиталей редкоземельного иона и лиганда, $\bar{\mathbf{R}}_a$, $\bar{\mathbf{R}}_b$ — радиус-векторы ядер центрального иона и лиганда.

Приведем далее численные значения входящих в (23) величин (в a. u.)

$\langle 4f0|(I+S)^{-1}|2s\rangle = -0.007891$,

$\varepsilon_{\mathrm{HF}}^{\mathrm{Yb}^{2+}} = -1.203$ [20],

$\varepsilon_{\mathrm{HF}}^{\mathrm{F}^-} = -1.074$ [21],

$\langle 4f0|h_{\mathrm{M}}|4f0\rangle = 0.7442$,

$\langle 2s|h_{\mathrm{M}}|2s\rangle = -0.3887$,

$\left\langle 2s\left|\frac{1}{|\mathbf{R}_a-\bar{\mathbf{r}}|}\right|2s\right\rangle = 0.2405$,

$\left\langle 4f0\left|\frac{1}{|\mathbf{R}_b-\bar{\mathbf{r}}|}\right|2s\right\rangle = 0.006175$,

$\langle 4f0, 2s|g|2s, 2s\rangle = 0.005696$,

$\langle 4f0|h_k|2s\rangle = -0.001151$,

$\langle 4f0|h_{\mathrm{M}}|2s\rangle = 0.00052$,

$\langle 4f0, 2p0|g|2s, 2p0\rangle = 0.0054398$,

$\langle 4f0, 2p1|g|2s, 2p1\rangle = 0.005182$,

$\left\langle 4f0\left|\frac{1}{|\mathbf{R}_a-\bar{\mathbf{r}}|}\right|2s\right\rangle = 0.0037184$,

$\langle 4f0, 5s|g|2s, 5s\rangle = 0.003581$,

$\langle 4f0, 5p0|g|2s, 5p0\rangle = 0.0042672$,

$\langle 4f0, 5p1|g|2s, 5p1\rangle = 0.0031746$,

$\langle 4f0, 4f0|g|2s, 4f0\rangle = 0.004031$,

$\langle 4f0, 4f1|g|2s, 4f1\rangle = 0.0038957$,

$\langle 4f0, 4f2|g|2s, 4f2\rangle = 0.0036116$,

$\langle 4f0, 4f3|g|2s, 4f3\rangle = 0.0033773$,

$\langle 4f0, 4d0|g|2s, 4d0\rangle = 0.0039504$,

$\langle 4f0, 4d1|g|2s, 4d1\rangle = 0.0037733$,

$\langle 4f0, 4d2|g|2s, 4d2\rangle = 0.0034723$,

$\langle 4f0, 4p0|g|2s, 4p0\rangle = 0.0040373$,

$\langle 4f0, 4p1|g|2s, 4p1\rangle = 0.0035423$,

$\langle 4f0, 4s|g|2s, 4s\rangle = 0.0037081$.

Вычисления проводились на волновых функциях [21]. Как видно из приведенных численных значений, все суммы имеют вид

$$\sum_{m_l m_s}\left[\langle 4f0, nlm_lm_s|g|2s, nlm_lm_s\rangle - \left\langle 4f0\left|\frac{1}{|\mathbf{R}_{nlm_lm_s}-\bar{\mathbf{r}}|}\right|2s\right\rangle\right] \le 0. \qquad (24)$$

Здесь $\bar{\mathbf{R}}_{nlm_lm_s}$ — радиус-вектор ядра иона, которому соответствует орбиталь $|nlm_lm_s\rangle$. Уже для 4*s*-оболочки происходит почти полная компенсация в выражении (24), и поэтому более глубокие оболочки можно не рассматривать. Взаимодействие перекрывание–ядро всегда больше, чем взаимодействие перекрывание–оболочка. Подставляя приведенные численные значения в (23), получим для амплитуды перехода значение, равное (в a. u.)

$$\langle\{\ldots, 4f0, \ldots\}|H_\Psi|\{\ldots, 2s, \ldots\}\rangle = -0.01056. \qquad (25)$$

Если использовать связь между величинами $\tilde{\gamma}$ и γ, определяемую выражением (22) и значением энергии переноса $|\Delta_{4f0,2s}| = 1$ a. u. [6], получим величину $\gamma_s = 0.007$. Величина γ_s, используемая при интерпретации экспериментальных данных как подгоночный параметр, обычно имеет значение $\gamma_s \approx 0.01$, т. е. достаточно хорошо согласуется с вычисленным в первом приближении значением, определяемым выражением (23). В данной работе все вычисления, связанные с неортогональностью орбиталей, относились к паре центральный ион–лиганд. Поэтому естественно в дальнейшем рассмотреть кластер, состоящий из парамагнитного иона и его ближайшего окружения, так как влияние перекрывания лиганд–лиганд может быть заметным [22] и, следовательно, матрица $\langle\xi|(I+S)^{-1}|\rangle$ должна быть определена на орбиталях всего кластера. Кроме того, очевидно, что для подтверждения модели, предложенной в [6], необходимо оценить значения параметров ковалентности $\gamma_{4f\sigma}$, $\gamma_{4f\pi}$, γ_{5ds}, $\gamma_{5d\sigma}$, $\gamma_{5d\pi}$ из первых принципов, что будет сделано в дальнейшем.

Список литературы

[1] R.E. Walstedt, S.W. Cheong. Phys. Rev. B **64**, 014 404 (2001).
[2] M.L. Falin, V.A. Latypov, B.N. Kazakov, A.M. Leushin, A. Bill, D. Lovy. Phys. Rev. B **61**, *14*, 9441 (2000).
[3] А. Абрагам, Б. Блини. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. М. (1972). 651 с.
[4] J.D. Axe, G. Burns. Phys. Rev. **152**, *1*, 331 (1966).
[5] J.M. Baker. J. Phys. C **1**, *6*, 1670 (1968).
[6] O.A. Anikeenok, M.V. Eremin, M.L. Falin, A.L. Konkin, V.P. Meiklyar. J. Phys. C **17**, *15*, 2813 (1984).
[7] J. Hubbard, D.E. Rimmer, F.R.A. Hopgood. Proc. Phys. Soc. **88**, *1*, 13 (1966).
[8] О.А. Аникеенок, М.В. Еремин. ФТТ **23**, *3*, 706 (1981).
[9] B.Z. Malkin, A.M. Leushin, A.I. Iskhakova, J. Heber, A. Altwein, K. Moller, I.I. Faslihanov, V.A. Ulanov. Phys. Rev. B **62**, *11*, 7063 (2000).

[10] М.В. Еремин, А.М. Леушин. ФТТ **16**, *7*, 1917 (1974).
[11] М.В. Еремин, А.А. Корниенко. ФТТ **19**, *10*, 3024 (1977).
[12] B.R. Judd. Second Quantization and Atomic Spectroscopy. The Johns Hopkins Press, Baltimore (1967).
[13] D. Monien, D. Pines, M. Takigava. Phys. Rev. B **43**, *1*, 258 (1991).
[14] J.M. Baker, L.M. Bluck. J. Phys. C **18**, *32*, 6051 (1985).
[15] P.W. Anderson. Solid State Phys. **14**, 145 (1963).
[16] М.В. Еремин. Спектроскопия кристаллов. Наука, Л. (1985). С. 150.
[17] О.А. Аникеенок. Деп. в ВИНИТИ от 06. 04 1987, рег. № 2442-В87.
[18] P.O. Lowdin. Adv. Quant. Chem. **5**, *1*, 185 (1970).
[19] D.S. McClure. NATO Agv. Study Inst. Chem. Lab. and St. Johns College. Oxford (1974). P. 113.
[20] K.M.S. Saxena, C. Malli. Numerical Hartree-Fock results for some Triply and Doubly Ionized Rare-Earts. Technical Report TR-1970-01. Department of Chemistry. Simon Fraser University.
[21] E. Clementi, L. Roetti. Atom. Data Nucl. Data Tabl. **14**, 177 (1974).
[22] А.П. Вала, Р.С. Дагис. Литов. физ. сб. **XII**, *2*, 265 (1972).