

УДК 541.66+541.67

ВОЗМОЖНОСТИ УПРОЩЕННЫХ СХЕМ ИЗУЧЕНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В Н-СВЯЗАННЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

© 2021 г. С. П. Долин^а, *, Т. Ю. Михайлова^а, Н. Н. Бреславская^а

^аИнститут общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия

*e-mail: dolin@igic.ras.ru

Поступила в редакцию 10.12.2020 г.

После доработки 16.12.2020 г.

Принята к публикации 17.12.2020 г.

На примере сегнетоэлектриков $K(H/D)_2PO_4$ предложен и обоснован упрощенный квантово-химический подход к описанию структурного фазового перехода при увеличении числа Н/D-связей в модельных кластерах. В этом случае упрощенное описание включает в себя использование в статистике фазового перехода только псевдоспиновых конфигураций, подчиняющихся правилу льда. Расчетами разных модельных систем проверена эффективность применения экономичного способа определения изинговских и слейтеровских констант. Основные результаты получены в рамках стандартного кластерного приближения Бете на тримерных кластерах двух типов (линейного и углового), симметрия которых существенно отличается от симметрии решетки при различном моделировании терминальных Н-связей. Проанализированы достоинства и недостатки предложенного подхода для описания термодинамики перехода и для возможности пробного моделирования структуры неоднородностей, связанных с доменными стенками и их границами.

Ключевые слова: Н-связанные сегнетоэлектрики, семейство KDP, структурный фазовый переход, квантово-химическое моделирование

DOI: 10.31857/S0044457X21050044

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа является продолжением исследований водородно-связанных сегнетоэлектрических (СЭ) материалов в рамках разрабатываемого нами теоретического подхода с применением различных квантово-химических (КХ) методов [1–7]. Здесь на примере СЭ-семейства KH_2PO_4 (KDP) [8] рассмотрены последствия усложнения структуры модельных кластеров (МК), поскольку их выбор является необходимой и во многом определяющей стадией предложенного алгоритма описания структурных фазовых переходов (СФП) с независимым КХ-определением всех параметров псевдоспинового гамильтониана (ПСГ). С учетом результатов работ в этом подходе по мономерным и димерным МК (модели Н4 и Н7) [4–7] были рассмотрены различные тримерные МК (Н10), а также ряд более сложных систем, включая пентамеры (Н16). Здесь и далее НN обозначает модельный кластер с N псевдоспинами, т.е. с N подвижными протонами на Н-связях. Последовательное рассмотрение расширяющихся кластеров помогает, в частности, при

анализе изменений энергетических и статистических характеристик при учете второй координатной сферы. Получение конкретных численных результатов с помощью КХ-методов естественно продолжить следующими в ряду простыми МК типа Н10 в виде тримерных Н-связанных кластеров (ТНК).

Отметим, что количество информации, необходимой для реализации нашего подхода в рамках модели Изинга и статистического приближения кластеров Бете (ПКБ), растет, как известно, по закону N^2 , где N – число псевдоспинов. Поэтому крайне желательна разработка разумной упрощенной схемы анализа. Ее обоснование и анализ соответствующих последствий составили вторую задачу этой работы.

Проверке также подлежит полученный ранее с помощью расчетов разными КХ-методами для ряда димерных МК вывод о наличии существенных различий в спектре Н-связанной подсистемы в тех случаях, когда более сложные МК обладают пониженной симметрией по сравнению с симметрией параэлектрической фазы [4–6]. Это позволи-

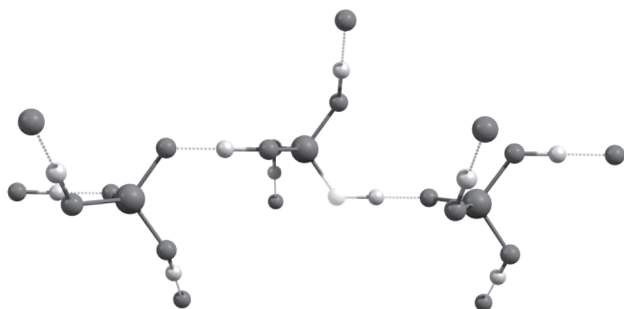


Рис. 1. Строение модельных кластеров на основе трех тетраэдров PO_4 . Линейный кластер.

ло продолжить поиск более реалистичных представлений о возможных молекулярных структурах доменных стенок и их границ с последующим анализом влияния этих и иных неоднородностей на наблюдаемые свойства рассматриваемых систем. Задача неэмпирического моделирования доменной структуры и ее динамики в сегнетоэлектриках типа порядок–беспорядок представляется особенно актуальной, так как (в отличие от сегнетоэлектриков типа смещения [9–14]) она пока мало исследована в литературе [15–18] (см. также цитируемую в [18] литературу).

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

На рис. 1 и 2 показаны пространственные структуры указанных выше тримерных изолированных H-связанных кластеров обоих типов (линейного и углового) состава $(\text{X}_3\text{PO} \dots \text{H} \dots \text{OPX}_2\text{O} \dots \text{H} \dots \text{OPX}_3)$, где $\text{X} = \text{OH}_2$ и H (модели Н10 и Н10*, см. ниже). Причины использования искусственного моделирования с $\text{X} = \text{H}$ будут подробно рассмотрены ниже. Анализ последствий расширения размеров указанных МК до ТНК, как и ранее, проводился в несколько стадий. На первой из них аналитически рассмотрена статистика структурного перехода порядок–беспорядок в рамках модели Изинга в варианте ПКБ. Вторая посвящена поиску упрощенного варианта КХ-анализа СФП и его обоснованию. Здесь с этой целью на примере KDP/DKDP проверен другой гораздо более экономичный по сравнению с применявшимся ранее [7] способ определения изинговских констант $J_\perp$ и $J_\parallel$ [19–22].

На последнем этапе кратко затронут вопрос о возможности применения результатов, полученных для ТНК, для изучения влияния доменных неоднородностей на различные свойства рассматриваемых систем.

Конкретная методика численных КХ-расчетов, как и ранее, включала применение почти всех КХ-методов программного комплекса Gaussian-09 вплоть до MP4/sdtq преимущественно

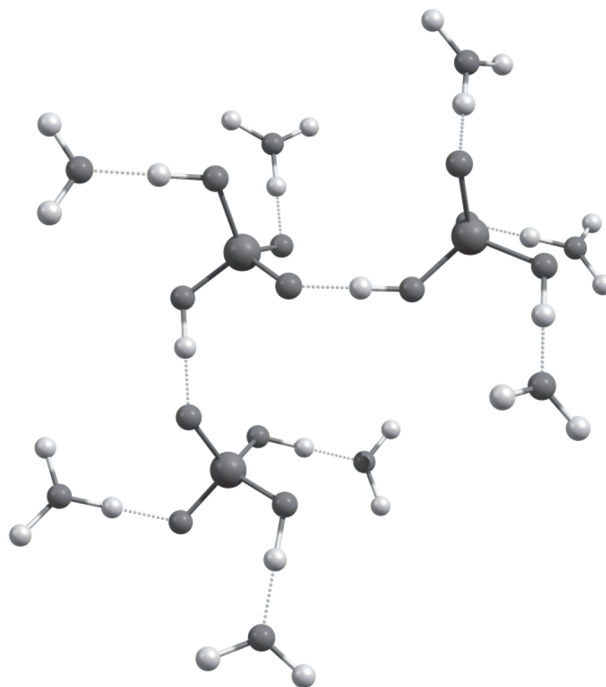


Рис. 2. Строение модельных кластеров на основе трех тетраэдров PO_4 . Угловой кластер.

но с базисным набором 6-311+G(d,p). Для всех МК проведены также расчеты методом DFT в варианте B3LYP с этим же базисным набором. Помимо указанных выше ТНК обоих типов с целью максимального упрощения методики расчетов энергетики водородной подсистемы в решетке была проверена возможность применения МК с моделированием в них только H-связей с использованием для этой цели ионов типа X_3O_2^+ , где $\text{X} = \text{H}, \text{Li}, \text{Na}$ [7].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Изменения в статистике СФП

В табл. 1 представлен набор наиболее важных для анализа СФП слейтеровских псевдоспиновых конфигураций (ПСК) в ТНК и некоторых более сложных H-связанных системах, определяющих наблюдаемые на опыте свойства указанных СЭ-материалов. Из сопоставления ПСК в модели Н10 с таковыми в Н4 и Н7 отметим основные свойства протонных спектров в указанных случаях. Прежде всего очевидно полное генетическое соответствие между ПСК, иллюстрирующее аддитивный характер модели Изинга, независимо от конкретной кластерной модели. Это позволяет в каждом случае применять простой способ нахождения основного уравнения для определения критической температуры перехода T_c (см. ниже). Последняя, как неоднократно отмечалось, явля-

Таблица 1. Генетическое соответствие между слейтеровскими (псевдоспиновыми) конфигурациями, подчиняющимися правилу льда, в модельных кластерах Н4–Н16 для KDP/ DKDP

p	1	2	3	4	5
h	4 (4)	7 (6)	10 (8)	13 (10)	16 (12)
СК	2^4	2^7	2^{10}	2^{13}	2^{16}
СКПЛ	2×3^1	2×3^2	2×3^3	2×3^4	2×3^5

p – число PO_4 -тетраэдров в МК, h – общее число Н-связей, включая терминальные (в скобках), СК – общее число слейтеровских конфигураций, СКПЛ – число конфигураций, подчиняющихся правилу льда.

Строение энергетического спектра слейтеровских конфигураций

N_{en}				
2	3	4	5	6
			aaaa [32] $4^{13}e_1$	aaaaa [64] $5^{16}e_1$
		aaa [16] $3^{10}e_1$	faaa [64] $3^{13}e_1$	faaaa [160] $4^{16}e_1$
	aa [8] 2^7e_1	faa [24] $2^{10}e_1$	ffaa [48] $2^{13}e_1$	ffaaa [160] $3^{16}e_1$
a [4] $4e_1$	fa [8] $7e_1$	ffa [12] $^{10}e_1$	fffa [16] $^{13}e_1$	fffaa [80] $2^{16}e_1$
f [2] 0	ff [2] 0	fff [2] 0	ffff [2] 0	ffffa [20] $^{16}e_1$
				fffff [2] 0

N_{en} – число подуровней в спектре Н-подсистемы, типы подуровней (f отвечает ферроэлектрическому упорядочению в единичном тетраэдре, а – антисегнетоэлектрическому упорядочению), кратность и изинговские энергии подуровней.

ется наиболее сложной для теоретического определения характеристикой СФП, поскольку именно в ней сильнее всего отражается конкурирующий характер влияния различных параметров ПСГ [19, 20]. Взаимодействия псевдоспинов в любых Н-связанных СЭ-системах ведут к стабилизации активной асимметричной фазы, тогда как эффекты туннелирования, а по нашим данным [7], и эффекты дальнего действия работают в обратном направлении.

Для ТНК и более сложных кластеров получены следующие уравнения, которые для наглядности сопоставлены ниже между собой:

$$(1) \text{ Н4: } 1 = 2^4 B_1 + \dots,$$

$$(2) \text{ Н7: } 1 = 1/3 [4^7 B_1 + 4^7 B_2 + 16^7 B_4 + 12^7 B_5 + \dots],$$

$$(3a) \text{ Н10: } 1 = 1/3 [2^{10} B_1 + 4^{10} B_2 + 8^{10} B_3 + \dots] \text{ (линейный)},$$

$$(3b) \text{ Н10*: } 1 = 1/3 [1^{10} B_1 + 8^{10} B_2 + 4^{10} B_3 + \dots] \text{ (угловой)},$$

$$(4a) \text{ Н13: } 1 = 1/5 [(32^{13} B_3 + 16^{13} B_4) + \dots] \text{ (линейный)},$$

$$(4b) \text{ Н13*: } 1 = 1 + 1/5 [-4^{13} B_1 + 14^{13} B_2 + 24^{13} B_3 + 8^{13} B_4 + \dots] \text{ (двухугловой)},$$

$$(5a) \text{ Н16: } 1 = 1/15 [-34^{16} B_1 + 40^{16} B_2 + 112^{16} B_3 + 80^{16} B_4 + 96^{16} B_5].$$

Приведенные формулы, где через $^p B_n = \exp(-n \times \times p e_1 / k_B T)$ обозначены больцмановские константы, были получены с использованием характери-

стик ПСК, приведенных в табл. 1. В этих статистических соотношениях параметры, описывающие эффекты туннелирования и дальнего действия, умышленно опущены (см. ниже). Кроме того, здесь также умышленно приведены только слагаемые, которые получены с ПСК, соответствующими правилу льда [23–25], и полностью опущены слагаемые, отвечающие так называемым заряженным ПСК. Причины этого легко понять, поскольку во всех случаях справедливой оказывается слейтеровская формула $T_c = p e_1 / \ln 2$. Хотя в случае Н4 и Н7 она и превышает T_c примерно вдвое, этот дефект, как было показано ранее, устраняется учетом и вкладов от однозарядных ПСК (но не двухзарядных, вклады от которых во всех случаях пренебрежимо малы) с последующим учетом эффектов туннелирования и дальнего действия [20]. Это позволяет предположить сохранение аналогичной ситуации в случае ТНК, а также в более сложных МК. Проведенный анализ влияния неучтенных однозарядных ПСК типа $[\text{K}]\text{HPO}_4^-$ и $[\text{K}]\text{H}_3\text{PO}_4^+$ в указанных МК показал, что оно невелико (не более 13%), и с ростом числа Н-связей в МК их учет в рамках ПКБ приводит к довольно медленному уменьшению T_c [20]. Однако при изучении доменных неоднородностей их роль может оказаться более значительной [26–29], что требует отдельного рассмотрения.

Расчеты изинговских констант $J_{\perp}$ и $J_{\parallel}$ с ТНК

Отметим, что ТНК являются наиболее простыми подходящими объектами для определения изинговских параметров другим способом, отличным от применявшегося ранее, в том числе и с помощью КХ-расчетов [1–7]. Он применим для любых систем и был апробирован нами при изучении СФП в материалах со сложной структурой неводородного каркаса диэлектрика, в частности для хромистой кислоты (α -HCrO₂), где выбор МК даже с простейшим представлением каркаса для КХ-расчетов необходимых параметров ПСГ, прежде всего констант взаимодействия, практически невозможен [7].

Этот метод определения изинговских констант подробно изложен в [20], поэтому здесь приведены только основные формулы для облегчения понимания его особенностей. В основе метода лежит предположение о возможности представления решеточных взаимодействий в любой фазе, прежде всего между протонами, в виде суммы парных взаимодействий.

Если обозначить через $R_r^{0i} = r_i \pm b_i \sigma_{ri}^z$ два возможных равновесных положения протона, где r_i – средняя координата иона в парафазе, а σ_{ri}^z – оператор Паули с собственными значениями +1 и –1, то для конфигурации, определяемой совокупностью значений σ_{ri}^z , потенциальная часть гамильтониана сегнетоэлектрика имеет вид:

$$V(R_r^{0i}) = \frac{1}{2} \sum_{rr'ij} V^{ij} (r_i - r'_j + b_i \sigma_{ri}^z - b_j \sigma_{r'j}^z).$$

Далее вводятся проекционные операторы вида $\sigma^{\pm} = (1 \pm \sigma^z)/2$, каждый из которых равен 1 и отличен от нуля лишь для одного состояния – состояния с $\sigma^z = +1$ для σ^+ и состояния с $\sigma^z = -1$ для σ^- . С использованием очевидного тождества для любой функции f от двух операторов σ_1^z и σ_2^z :

$$\begin{aligned} f(x\sigma_1^z + y\sigma_2^z) &= (\sigma_1^+ + \sigma_1^-)(\sigma_2^+ + \sigma_2^-) \times \\ &\times f(x\sigma_1^z + y\sigma_2^z) = \sigma_1^+ \sigma_2^+ f(x+y) + \\ &+ \sigma_1^+ \sigma_2^- f(x-y) + \sigma_1^- \sigma_2^+ f(-x+y) + \\ &+ \sigma_1^- \sigma_2^- f(-x-y) \end{aligned}$$

можно получить ожидаемое представление потенциала взаимодействия в виде:

$$V(R_r^{0i}) = A + \sum_{ri} \sigma_{ri}^z B^i - \frac{1}{2} \sum_{rr'ij} J^{ij} (r - r') \sigma_{ri}^z \sigma_{r'j}^z,$$

где введенные константы A , B и J выражаются в данном случае через потенциальные члены $V_{\alpha\alpha'}^{ij} = V^{ij}(r_i - r_f + \alpha b + \alpha' b')$ с $\alpha, \alpha' = \pm 1$ следующим образом:

$$A = \frac{1}{2} \sum_{rr'ij} A^{ij} (r - r'), \quad B = \sum_{rj} B^{ij} (r - r'),$$

$$A^{ij} (r - r') = \frac{1}{4} (V_{++}^{ij} + V_{+-}^{ij} + V_{-+}^{ij} + V_{--}^{ij}),$$

$$B^{ij} (r - r') = \frac{1}{4} (V_{++}^{ij} + V_{+-}^{ij} - V_{-+}^{ij} - V_{--}^{ij}),$$

$$J^{ij} (r - r') = \frac{1}{4} (-V_{++}^{ij} + V_{+-}^{ij} + V_{-+}^{ij} - V_{--}^{ij}).$$

При практическом использовании этих формул необходимо помнить, что зависящая от спиновых переменных вторая сумма в последней тройке уравнений с константами B^{ij} , определяющая величину продольного электрического поля для любой фазы, должна быть тождественно равна нулю. Этот момент детально обсуждался в [20], где показано, что нарушение такого соотношения способствует появлению ошибок качественного характера, приводя к ненулевой поляризации при любых температурах, нарушая тем самым сам факт существования СФП. Эта особенность указанного способа представления потенциала была нами “устранена” простым путем с использованием усредненных величин $(V_{+-}^{ij} + V_{-+}^{ij})/2$ и $(V_{++}^{ij} + V_{--}^{ij})/2$. По нашим оценкам, связанные с этим погрешности превышают величину параметра e_1 не более чем на 20–30 К.

Таким образом, в методе проекционных операторов удается представить потенциал взаимодействия псевдоспинов в изинговской форме, пригодной для применения КХ-расчетов. Такие расчеты были выполнены для ряда ТНК и привели к обнадёживающим результатам, имея в виду дальнейшее увеличение размеров МК для изучения влияния доменов и их границ. Было показано, что если ТНК с $X = \text{OH}_2$ в качестве терминальных Н-связей (рис. 1, 2) даже в точечном приближении (без оптимизации геометрии) требуют на расчет каждой ПСК (их число в разных ТНК равно 27 или 54) значительных временных затрат, то ТНК с $X = \text{H}$ обладают несопоставимой экономичностью. В этом случае для определения каждой из двух изинговских констант нужны четыре точки, что позволяет использовать методы более высокого уровня, даже MP4/sdtq. При этом полученные оценки обеих слейтеровских констант e_1 и e_2 в случае H10 (160–200 и 760–900 К соответственно) лежат в тех же пределах, что и полученные ранее в H4 и H7 (табл. 2) [5, 6]. Такое постоянство основных энергетических параметров взаимодействия позволяет использовать только параметр e_1 , а e_2 считать поправкой, которую трудно оценить с учетом полученных ранее значений методом масштабных множителей, поскольку, согласно нашим расчетам, отношение $e_2/e_1 = 4.5$ –5.0. Это позволяет сохранить формулу

Таблица 2. Сопоставление результатов КХ-расчетов изинговских констант ($J_{\perp}$, $-J_{\parallel}$) в К и отношения слейтеровских параметров (e_1 и e_2) для KDP/DKDP, полученных методом операторов проектирования (МОП) и стандартным методом

KDP

Параметр	DFT	RHF	MP2	MP4	LI	DFT	RHF	MP2	MP4	LI
	МОП					стандартный				
$J_{\perp}$	395	430	440	443	418	313	369	356	362	335
$-J_{\parallel}$	352	382	386	394	369	274	331	312	319	293
$^{10}e_1$	171	193	215	195	193	157	152	175	174	166
$^{10}e_2$	876	956	988	984	930	706	815	798	810	752
$^{10}e_3$	3160	3435	3518	3548	3337	2515	2957	2844	2889	2680
e_2/e_1	5.1	5.0	4.6	5.0	4.8	4.5	5.4	4.6	4.7	4.5

DKDP

Параметр	DFT	RHF	MP2	LI	DFT	RHF	MP2	LI
	МОП				стандартный			
$J_{\perp}$	569	612	631	599	446	524	504	475
$-J_{\parallel}$	507	545	554	530	397	474	444	421
$^{10}e_1$	248	269	307	277	198	201	239	218
$^{10}e_2$	1261	1357	1415	1337	991	1148	1127	1060
$^{10}e_3$	4544	4885	5042	4703	3926	4184	4035	3979
e_2/e_1	5.1	5.0	4.6	4.8	5.0	5.7	4.7	4.8

Приведены результаты, полученные в Л-базисе 6/311+(d,p), во всех расчетах использована опытная геометрия [10] при 293 К, LI = (DFT + MP2)/2, MP4 с усреднением по четырем вариантам, включая MP4/sdtq, стандартный вариант — с терминальными тетраэдрами вида PO₄-4H-4(OPH₃).

Слейтера, но уже в виде $T_c = e_1^*/\ln 2$ с последующим учетом таким же способом, как и ранее, эффектов туннелирования и дальнего действия. Отметим также справедливость полученного ранее в расчетах мономеров и димеров деления спектра Н-подсистемы на четыре группы, определяемые слейтеровскими параметрами e_1 , e_2 , e_3 , с удивительно точным и в этом случае выполнением соотношения $4e_2 = 2e_1 + e_3$ (табл. 2) [5, 6]. Вместе с тем необходимо подчеркнуть, что в случае ТНК (как и в димерах) основной недостаток подхода связан с сильным нарушением аддитивности в спектре ПСК, показанном в табл. 3. Тем не менее средние значения обоих параметров e_1 и e_1^* при этом сохраняют разумные значения.

В итоге все это приводит к возможности применения подхода правила льда (ППЛ) для более сложных кластерных систем как к самостоятельному способу описания многих СЭ-материалов, включая и семейство KDP [24].

Как и в случае димеров [5, 6], была предпринята попытка еще в большей степени упростить наш

подход и рассматривать только энергетику Н-подсистемы. Для этого (кроме иона (H₃O₂⁻)) при моделировании Н-связей несегнетоэлектрические атомы Н в модельном кластере заменяли на Li и Na. К сожалению, полученные оценки обеих изинговских и слейтеровских констант во многих случаях выходят за рамки приведенных выше значений этих параметров. Причина этого связана с тем, что “лишние” связи О–Н и О–Li (Na)

Таблица 3. Спектры типа СКПЛ для ТНК (К)

Энергия	DFT	RHF	MP2	LI	DFT	RHF	MP2	LI
	угловой кластер				линейный кластер			
3E ₁	494	677	756	625	500	489	591	546
2E ₁	401	405	460	431	104	42	159	132
E ₁	219	233	247	233	270	292	320	295
<E ₁ >	195	221	243	219	163	159	199	181

Приведены результаты, полученные в базисе 6/311+(d,p), во всех расчетах использована опытная геометрия [10] при 293 К, LI = (DFT + MP2)/2.

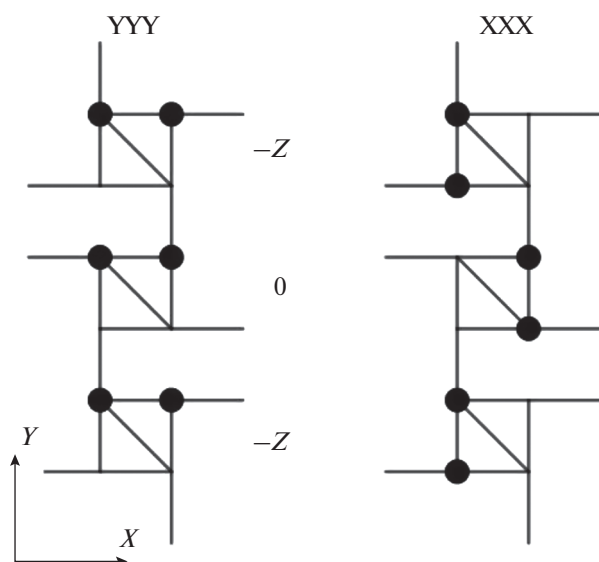


Рис. 3. Схема строения СКПЛ основного состояния и состояния с другим типом упорядочения в ТНК. Линейный кластер.

оказывают довольно сильное влияние на энергетику Н-подсистемы, поскольку их вклады в разные ПСК не аддитивны. Это еще раз подтвердило возможность подобного упрощения лишь при изучении низкоразмерных систем Н-связанных (квази)нульмерных и (квази)одномерных [30–32], но не трехмерных. Поэтому результаты полученных таким образом оценок параметров взаимодействия для описания чисто трехмерных KDP/DKDP в дальнейшем не использовались, хотя на качественном уровне они остаются разумными.

Расчеты с $X = \text{OH}_2$

Проверка возможностей упрощенного ППЛ для обеих форм ТНК с $X = \text{OH}_2$ проведена в основном тремя разными методами (MP2, RHF, DFT) и фактически привела к тем же выводам, что и расчеты димеров. Наиболее важным является вывод о возможности, как и в случае димеров, описания термодинамики СФП в рамках применяемого ПКБ, но при строго обязательном усреднении энергий СПК в каждой подгруппе спектра Н-подсистемы. При этом сохраняется не только основное СЭ-состояние, но и полученные из расчетов численные оценки наблюдаемых свойств, прежде всего критической температуры T_c . Отказ от указанного усреднения еще в большей степени, чем в димерах, и по уже отмечавшейся причине понижения симметрии с потерей эквивалентности псевдоспинов приводит к существенным изменениям в описании СФП вплоть до потери

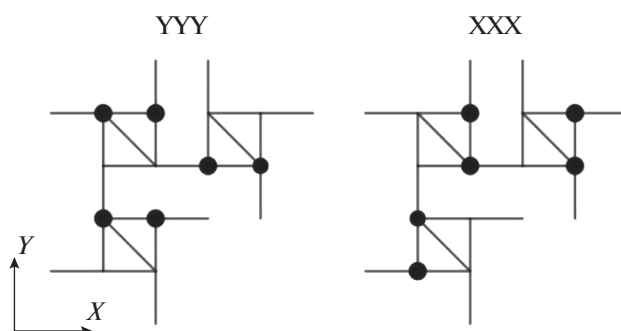


Рис. 4. Схема строения СКПЛ основного состояния и состояния с другим типом упорядочения в ТНК. Угловой кластер.

основного СЭ-состояния МК в структурах KDP и DKDP.

В этом случае основным состоянием (наши обозначения, рис. 3, 4 и табл. 1) становится полярная ПСК вида [YYY]. Она сохраняется в обеих формах ТНК, и ее относительная стабильность по сравнению с другими ПСК вида [aaa] (прежде всего упорядоченной, но неполярной – XXX) велика в обоих случаях. При этом, по данным всех указанных методов расчета, в линейном МК она составляет ~1000 К и оказывается вдвое больше по сравнению с угловым. Отметим, что приведенные оценки хотя и были получены при двух разных способах моделирования терминальных Н-связей, но в них не было учтено влияние катионов, поэтому они не могут считаться окончательными.

Поскольку интерес к низкосимметричным расширенным МК связан с возможностью моделирования молекулярного строения доменных стенок и их границ, проведенный анализ, на наш взгляд, позволяет перейти к этой задаче. Эти и смежные вопросы будут обсуждены в следующей публикации.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа поддержана РФФИ (№ 19-03-00443) и частично выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований (№ 44.2).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Levin A.A., Dolin S.P. // J. Mol. Struct. 2000. V. 552. P. 39. [https://doi.org/10.1016/S0022-2860\(00\)00457-9](https://doi.org/10.1016/S0022-2860(00)00457-9)
2. Dolin S.P., Mikhailova T.Yu., Breslavskaya N.N. et al. // Int. J. Quant. Chem. 2016. V. 116. № 3. P. 202. <https://doi.org/10.1002/qua.25037>

3. Долин С.П., Михайлова Т.Ю., Бреславская Н.Н. // Журн. физ. химии. 2014. Т. 88. С. 1686.
<https://doi.org/10.7868/80044453714110065>
4. Левин А.А., Долин С.П., Михайлова Т.Ю. // Журн. Рос. хим. об-ва. 2007. Т. 51. С. 139.
5. Долин С.П., Михайлова Т.Ю., Бреславская Н.Н. // Журн. неорган. химии. 2020. Т. 65. № 4. С. 522.
6. Долин С.П., Михайлова Т.Ю., Бреславская Н.Н. // Журн. неорган. химии. 2020. Т. 65. № 7. С. 931.
<https://doi.org/10.31857/S0044457X20070053>
7. Dolin S.P., Flyagina I.S. et al. // Int. J. Quant. Chem. 2007. V. 107. P. 2409.
<https://doi.org/10.1002/qua.21406>
8. Nelmès R.J., Tun Z., Kuhs W.F. // Ferroelectrics. 1987. V. 71. P. 125.
<https://doi.org/10.1080/00150198708224833>
9. Shur V.Ya., Akhmatkhanov A.R., Lobov A.I., Turygin A.P. // J. Adv. Dielectr. 2015. V. 5. P. 1550015.
<https://doi.org/10.1142/S2010135X15500150>
10. Ishibashi Y. // Ferroelectrics. 1989. V. 98. P. 193.
11. Bullbich A.A., Gufan Yu.M. // Ferroelectrics. 1989. V. 98. P. 277.
12. Pertsev N.A., Arlt G. // Ferroelectrics. 1992. V. 132. № 1. P. 27.
13. Shur V.Ya. // J. Mater. Sci. 2006. V. 41. P. 199.
<https://doi.org/10.1007/s10853-005-6065-7>
14. Shur V.Ya. // Handbook of advanced dielectric, piezoelectric and ferroelectric materials, chapter. 2008. P. 622.
<https://doi.org/10.1533/9781845694005.5.622>
15. Moore M.A., Willians H.C.W.L. // J. Phys. C. 1972. V. 5. P. 3168.
16. Tentrup T., Weyrich K.H., Siems R. // Jpn. J. Appl. Phys. 1985. V. 24. P. 571.
17. Kamysheva L.N., Fedosov V.N., Sidorkin A.S. // Ferroelectrics. 1976. V. 13. P. 463.
18. Стефанович Л.И., Мазур О.Ю. Формирование доменных структур в сегнетоэлектриках в сильноне-
равновесных условиях под влиянием внешних воз-
действий. Дніпро: Середняк Т.К., 2019. 100 с.
19. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родствен-
ные им материалы. М.: Мир, 1981.
20. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию
сегнетоэлектриков. М.: Физматлит, 1973. 328 с.
21. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы
сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.:
Наука, 1983. 241 с.
22. Блины Р. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектри-
ки. Динамика решетки. М.: Мир, 1975. 398 с.
23. Маттис Д. Теория магнетизма. М.: Мир, 1967. 406 с.
24. Займан Дж. Модели беспорядка. М.: Мир, 1982.
592 с.
25. Pauling L. The nature of the chemical bond. N.Y.: Cor-
nell University Press, 1960. 645 p.
26. Сидоркин А.С. Доменная структура в сегнетоэлек-
триках и родственных материалах. М.: Физматлит,
2000. 240 с.
27. Сидоркин А.С. // Физика твердого тела. 1989. Т. 31.
№ 9. С. 293.
28. Bornarel J. // Ferroelectrics. 1987. V. 71. P. 255.
29. Meilikhov E.Z., Farzetdinova R.M. // Phys. Rew. E.
2005. V. 71. P. 046111.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.046111>
30. Mikhaylova T.Yu., Breslavskaya N.N., Dolin S.P. // Russ. J.
Inorg. Chem. 2017. V. 62. P. 935. [Михайлова Т. Ю., Бре-
славская Н.Н., Долин С.П. // Журн. неорган. химии.
2017. Т. 62. С. 934.]
<https://doi.org/10.1134/S003602361707004X>
31. Mikhaylova T.Yu., Breslavskaya N.N., Dolin S.P. // Russ. J.
Inorg. Chem. 2018. V. 63. P. 61. [Михайлова Т.Ю., Бре-
славская Н.Н., Долин С.П. // Журн. неорган. химии.
2018. Т. 63. С. 66.]
<https://doi.org/10.1134/S0036023618010060>
32. Михайлова Т.Ю., Бреславская Н.Н., Долин С.П. // Журн. неорган. химии. 2017. Т. 62. С. 1593.
<https://doi.org/10.7868/S0044457X17120066>