

УДК 548.3

PACS 61.66.Fn

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.47-53

І.І. Небола, А.Я. Штейфан, А.Ф. Катаниця, І.П. Студеняк

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

e-mail: ivan.nebola@uzhnu.edu.ua

ФОНОННІ СПЕКТРИ СІМЕЙСТВА АРГІРОДИТІВ

На прикладі $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ розглянута кристалічна структура сімейства аргіродитів. В концепції надпросторової симетрії описана кристалічна структура, представлено повний (3+3)-мірний базис, сукупність векторів модуляції та масових модуляційних функцій. Проведено розрахунок дисперсії фононного спектру, наведено дисперсійні залежності фононного спектру у високосиметричних напрямках ($\Gamma - X - M - R - \Gamma - M$) зони Бриллюена даного кристалу

Ключові слова: аргіродити, кристалічна структура, надгратка, надпросторова симетрія, фононний спектр, Maple.

Вступ

В останні десятиріччя іоніка твердого тіла розвинулася в широку міжгалузеву науку, що охоплює фізику, хімію, матеріалознавство та приладобудування. Так, суперіонні провідники (СП) знайшли широке застосування як акумуляторні батареї, паливні комірки, газові сенсори та інші електрохімічні пристрої [1-3]. Крім того, СП успішно використовуються для розробки іонно-селективних електродів [4], високотемпературних нагрівних елементів [2], інтеграторів, генераторів з автоматичною розгорткою і т.д. [5]. Одним з найбільш яскравих представників СП є представник сімейства аргіродитів – кристал сполуки $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$, дослідження й моделювання властивостей якого лягли в основу цієї нашої роботи.

Кристалічна структура сполуки

$\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$

Дослідження кристалічної структури

високотемпературної фази сполуки $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ було розпочато у роботах [6-10], де наведено параметри ґратки, координати атомів, температурні коефіцієнти зміни параметрів, заселеність, кути і відстані, що характеризують розміщення атомів у кристалічній ґратці.

Аналіз кристалічної структури сімейства аргіродиту вказує на значну зміну заселеності ряду кристалографічних позицій.

Для розрахунку методом ab initio значень фононних частот в точці Γ для кристалу $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ в роботі [11] була вибрана модель кристалічної структури з координатами атомів і їх заселеністю, які представлені в табл.1 Це дало можливість для модельних розрахунків дисперсійних залежностей фононного спектру по зоні Бриллюена в даній роботі вибрати структуру з позиціями атомів, наведених в табл.1.

Таблиця 1. Кристалографічні позиції атомів модельних кристалічних структур

Атом	Координати згідно [10]	Заселеність згідно [10]	Координати згідно [11]	Заселеність згідно [11]	Координати згідно нашої роботи	Заселеність згідно нашої роботи
Cu(1)	(0.02362, 0.25, 0.25)	0.624	(0.01747, 0.25, 0.25)	1.0	(0.0, 1/4, 1/4)	1.0
Cu(2)	(0.01914, 0.30918, 0.30918)	0.376		0.0		0.0

Br	(0,0,0)	0.989	(0,0,0)	1.0	(0,0,0)	1.0
S(1)	(0.25, 0.25, 0.25)	0.989	(0.25,0.25,0.25)	1.0	(1/4,1/4,1/4)	1.0
S(2)	(0.62183,0.62183, 0.62183)	1.0	(0.62183,0.62183,0.62183)	1.0	(5/8,5/8,5/8)	1.0
P	(0.5,0.5,0.5)	1.0	(0.5,0.5,0.5)	1.0	(1/2,1/2,1/2)	1.0

Така кристалічна структура, слідуючи за [12, 13], може біти описана, як окупацийно-модульована гранецентрована кубічна (ГЦУ) надгратка ((4a,4a,0), (4a,0,4a), (0,4a,4a)).

$$\begin{aligned}
 a_1 &= (-a, a, a, 1/4b, -1/4b, -1/4b); & a_1^* &= (0, \pi/a, \pi/a, 0, 0, 0); \\
 a_2 &= (a, -a, a, -1/4b, 1/4b, -1/4b); & a_2^* &= (\pi/a, 0, \pi/a, 0, 0, 0); \\
 a_3 &= (a, a, -a, -1/4b, -1/4b, 1/4b); & a_3^* &= (\pi/a, \pi/a, 0, 0, 0, 0); \\
 a_4 &= (0, 0, 0, 0, b, b); & a_4^* &= (-1/4 \pi/a, 1/4 \pi/a, 1/4 \pi/a, -\pi/b, \pi/b, \pi/b); \\
 a_5 &= (0, 0, 0, b, 0, b); & a_5^* &= (1/4 \pi/a, -1/4 \pi/a, 1/4 \pi/a, \pi/b, -\pi/b, \pi/b); \\
 a_6 &= (0, 0, 0, b, b, 0); & a_6^* &= (1/4 \pi/a, 1/4 \pi/a, -1/4 \pi/a, \pi/b, \pi/b, -\pi/b).
 \end{aligned} \tag{1}$$

Використовуючи базиси (1), були з генеровані сукупності позицій надгратки та векторів модуляції q_i (Таблиця 2).

Повна сукупність 32-ох можливих позицій атомів охоплює 10 орбіт, а множина 32-х векторів модуляції розбивається на 10 зірок.

Це дозволяє записати систему рівнянь для визначення амплітуд функції масової модуляції $\rho_i(q_i, b^*)$.

$$\begin{aligned}
 32\rho_1 &= M_1 + M_2 + M_3 + M_4 + 6M_5 + 6M_6 + 4M_7 + 4M_8 + 4M_9 + 4M_{10}; \\
 32\rho_2 &= M_1 + M_2 + M_3 + M_4 + 6M_5 + 6M_6 - 4M_7 - 4M_8 - 4M_9 - 4M_{10}; \\
 32\rho_3 &= M_1 + M_2 - M_3 - M_4 - 6M_5 + 6M_6 + 4iM_7 - 4iM_8 - 4iM_9 + 4iM_{10}; \\
 32\rho_4 &= M_1 + M_2 - M_3 - M_4 - 6M_5 + 6M_6 - 4iM_7 + 4iM_8 + 4iM_9 - 4iM_{10}; \\
 32\rho_5 &= M_1 + M_2 - M_3 - M_4 + 2M_5 - 2M_6 \\
 32\rho_6 &= M_1 + M_2 + M_3 + M_4 - 2M_5 - 2M_6; \\
 32\rho_7 &= M_1 - M_2 - M_3 + iM_4 + \sqrt{2}(1+i)M_7 + \sqrt{2}(1-i)M_8 - \sqrt{2}(1-i)M_9 - \sqrt{2}(1+i)M_{10};
 \end{aligned}$$

Наведений розв'язок задає бездефектну узагальнену структуру з хімічною формулою $VHEFC_6D_6A_4B_4K_4M_4$, а XY_2O_4 буде окремим випадком при $V=E=X$; $H=F=C=D=A=0$; $D=K=O$; $M=Y$. Для того, щоб отримати амплітуди

$$\begin{aligned}
 \rho_1 &= 1/32(M_{Br} + M_P + M_{S(1)} + 6M_{Cu} + 4M_{S(2)}); \\
 \rho_2 &= 1/32(M_{Br} + M_P + M_{S(1)} + 6M_{Cu} - 4M_{S(2)}); \\
 \rho_3 &= 1/32(M_{Br} - M_P - M_{S(1)} + 6M_{Cu} + 4iM_{S(2)}); \\
 \rho_4 &= 1/32(M_{Br} - M_P - M_{S(1)} + 6M_{Cu} - 4iM_{S(2)}); \\
 \rho_5 &= 1/32(M_{Br} - M_P - M_{S(1)} - 2M_{Cu});
 \end{aligned}$$

Для цього використаємо (3+3) - мірний простір з базисами прямого і оберненого простору в метриці об'ємноцентрованої гратки (ОЦК) ((-a,a,a), (a,-a,a), (a,a,-a)):

Для тривимірної проекції структури:

$$M(n, 0) = \sum_{l=1}^{10} \rho_l(q_l, 0) \sum_{m=1}^{n} e^{i(q_m, n)} \tag{2}$$

де $M(n, 0)$ – маса атома в позиції n , ($\Delta n = 0$), l - задає номер зірки, а m – номер вектора зірки.

Розв'язавши її отримаємо $\rho_i(q_i, 0^*)$:

$$\begin{aligned}
 32\rho_8 &= M_1 - M_2 + M_3 - iM_4 + \sqrt{2}(1-i)M_7 + \sqrt{2}(1+i)M_8 - \sqrt{2}(1+i)M_9 - \sqrt{2}(1-i)M_{10}; \\
 32\rho_9 &= M_1 - M_2 - M_3 + iM_4 - \sqrt{2}(1-i)M_7 - \sqrt{2}(1+i)M_8 + \sqrt{2}(1+i)M_9 + \sqrt{2}(1-i)M_{10}; \\
 32\rho_{10} &= M_1 - M_2 + M_3 - iM_4 - \sqrt{2}(1+i)M_7 - \sqrt{2}(1-i)M_8 + \sqrt{2}(1-i)M_9 + \sqrt{2}(1+i)M_{10}.
 \end{aligned} \tag{3}$$

модуляційних функцій суперіоніка Cu_6PS_5Br підставимо $M_1=M_{Br}$; $M_3=M_P$; $M_4=M_{S(1)}$; $M_6=M_{Cu(1)}$; $M_{10}=M_{S(2)}$; $M_2=M_5=M_7=M_8=M_9=0$. Тоді для нашого випадку матимемо:

$$\begin{aligned}
 \rho_6 &= 1/32(M_{Br} + M_P + M_{S(1)} - 2M_{Cu}); \\
 \rho_7 &= 1/32(M_{Br} - iM_P + iM_{S(1)} - \sqrt{2}(1+i)M_{S(2)}); \\
 \rho_8 &= 1/32(M_{Br} + iM_P - iM_{S(1)} - \sqrt{2}(1-i)M_{S(2)}); \\
 \rho_9 &= 1/32(M_{Br} - iM_P + iM_{S(1)} + \sqrt{2}(1-i)M_{S(2)}); \\
 \rho_{10} &= 1/32(M_{Br} + iM_P - iM_{S(1)} + \sqrt{2}(1+i)M_{S(2)}).
 \end{aligned} \tag{4}$$

Таблиця 2. Сукупності позицій об'єднаних в орбіти та модуляційних векторів у – зірки.

Атоми	№ орбіти (позиції)	Позиції атомів, об'єднані в орбіти	№ зірки (модуляційного вектора)	Модуляційні вектори, об'єднані в зірки
Br	1 (1)	[0, 0, 0]	1 (1)	[0, 0, 0]
P	2 (2)	[4a, 0, 0]	2 (2)	[π/a , 0, 0]
S(1)	3 (3)	[2a, 2a, 2a]	3 (3)	[$\pi/2a$, $\pi/2a$, $\pi/2a$]
	4 (4)	[-2a, -2a, -2a]	4 (4)	[- $\pi/2a$, - $\pi/2a$, - $\pi/2a$]
	5 (5-10)	[2a, 0, 0]; [0, 2a, 0]; [0, 0, 2a]; [-2a, 0, 0]; [0, -2a, 0]; [0, 0, -2a];	5 (5-10)	[$\pi/2a$, 0, 0]; [0, $\pi/2a$, 0]; [0, 0, $\pi/2a$]; [- $\pi/2a$, 0, 0]; [0, - $\pi/2a$, 0]; [0, 0, - $\pi/2a$]
Cu(1)	6 (11-16)	[2a, 2a, 0]; [0, 2a, 2a]; [2a, 0, 2a]; [-2a, 2a, 0]; [0, 2a, -2a]; [-2a, 0, 2a]	6 (11-16)	[$\pi/2a$, $\pi/2a$, 0]; [0, $\pi/2a$, $\pi/2a$]; [$\pi/2a$, 0, $\pi/2a$]; [- $\pi/2a$, $\pi/2a$, 0]; [0, $\pi/2a$, - $\pi/2a$]; [- $\pi/2a$, 0, $\pi/2a$]
	7 (17-20)	[a, a, a]; [-a, -a, a]; [-a, a, -a]; [a, -a, -a]	7 (17-20)	[$\pi/4a$, $\pi/4a$, $\pi/4a$]; [- $\pi/4a$, - $\pi/4a$, $\pi/4a$]; [- $\pi/4a$, $\pi/4a$, - $\pi/4a$]; [$\pi/4a$, - $\pi/4a$, - $\pi/4a$]
	8 (21-24)	[-a, -a, -a]; [-a, a, a]; [a, a, -a]; [a, -a, a]	8 (21-24)	[- $\pi/4a$, - $\pi/4a$, - $\pi/4a$]; [- $\pi/4a$, $\pi/4a$, $\pi/4a$]; [$\pi/4a$, $\pi/4a$, - $\pi/4a$]; [$\pi/4a$, - $\pi/4a$, $\pi/4a$]
	9 (25-28)	[3a, 3a, 3a]; [-3a, -3a, 3a]; [-3a, 3a, -3a]; [3a, -3a, -3a]	9 (25-28)	[$3\pi/4a$, $3\pi/4a$, $3\pi/4a$]; [- $3\pi/4a$, - $3\pi/4a$, $3\pi/4a$]; [- $3\pi/4a$, $3\pi/4a$, - $3\pi/4a$]; [$3\pi/4a$, - $3\pi/4a$, - $3\pi/4a$]
S(2)	10(29-32)	[-3a, -3a, -3a]; [-3a, 3a, 3a]; [3a, 3a, -3a]; [3a, -3a, 3a]	10(29-32)	[- $3\pi/4a$, - $3\pi/4a$, - $3\pi/4a$]; [- $3\pi/4a$, $3\pi/4a$, $3\pi/4a$]; [$3\pi/4a$, $3\pi/4a$, - $3\pi/4a$]; [$3\pi/4a$, - $3\pi/4a$, $3\pi/4a$]

Дисперсійні криві фононних спектрів складних кристалів визначаються як розв'язки матричного рівняння при умові рівності нулю визначника [14-16]:

$$|D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} - \omega^2 \rho_{(i-j)} \delta_{\alpha\beta}| = 0 \quad (5)$$

де α, β – x, y, z, \mathbf{k} – хвильовий вектор, \mathbf{q}_i – вектори модуляції, $\rho_i(\mathbf{q}_i, \mathbf{b}^*)$ амплітуди функції масової модуляції задані для модуляційних векторів $\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j$ а $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$ – динамічні матриці одноатомного ОЦК кристалу, визначені у $\mathbf{k} + \mathbf{q}_i$ точці зони Бриллюена ($i = 1, 2, \dots, 32$) згідно [17]:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i) = \sum_{(n \neq 0)} \alpha_n \frac{n_\alpha n_\beta}{n^2} (1 - e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i) \cdot \mathbf{n}}) \quad (6)$$

де α_n силова постійна між 0 і n сусідом, n_α, n_β – проекції вектора \mathbf{n} на осі α, β .

Розрахунок фононних спектрів проводився в програмному середовищі Maple. Розраховані графічні залежності дисперсії фононних віток кристалу $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ вздовж ліній $\Gamma - X - M - R - \Gamma - M$ приведені на (Рис.1.). Отримані результати для точки Γ і їх порівняння з літературними даними представлено у Таблиці 3.

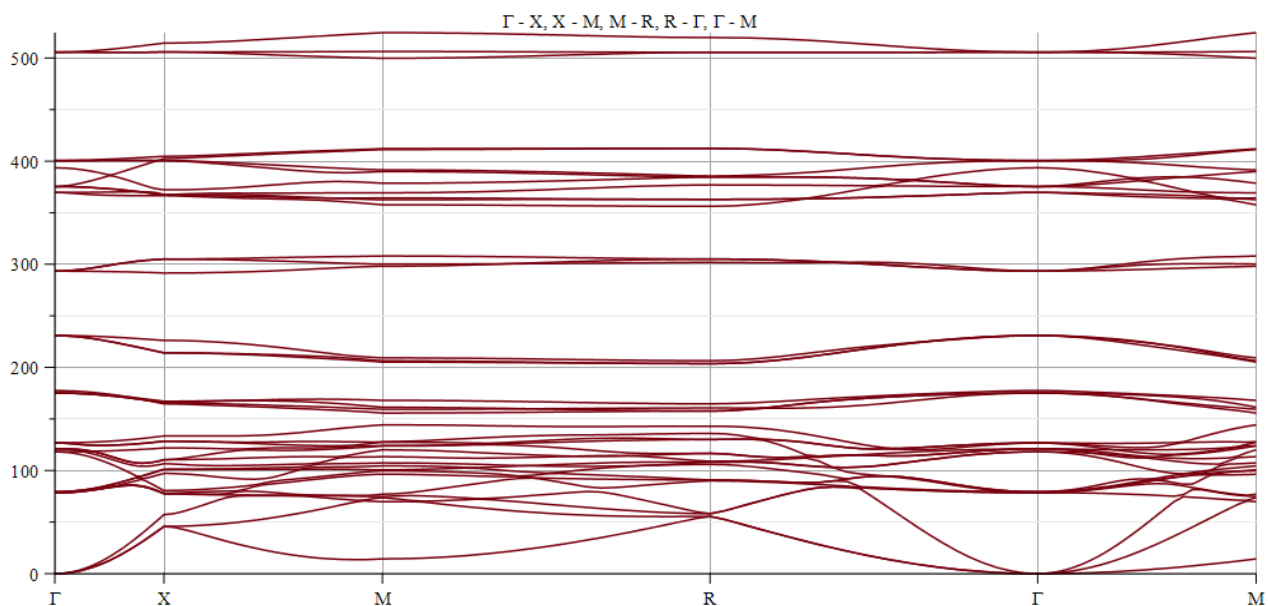


Рис.1. Фононні спектри кристалу $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$

Таблиця 3. Довгохвильові частоти коливань (в cm^{-1}) в кубічній фазі кристалу $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$

Симетрія	Теорія [11]	Експеримент [11]	Експеримент (наші дані)
F_2	72.3i (TO); 59i (LO)		
F_1	51.7i (TO); 20i (LO)		
F_2	74.2	74	78.3
F_1	80.8	78	79.3
F_2	109.2		121.1
E	147.6	156	118.2
A	206.0	234	177.5
F_2	211.0	245	126.8
F_1	317.5		293.7
F_2	320.0	316	375.4
E	347.0		369.6
F_2	348.9		400.5
A	415.4	427	393.6
F_2	511.3i (TO); 521i (LO)	547 (TO); 558 (LO)	505.7

Висновки

Порівняння розрахованих нами дисперсних кривих (Рис. 1.) з даними комбінаційного розсіювання та

першопринципних розрахунків [11] кристалів $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ (Табл. 3) показало, що результати добре узгоджуються між собою.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Julien C. Technological application of solid state ionics // Mater. Sci. Eng.: B. – 1990. – V.6, No.1. – P.9-28.
2. Yugami H., Ishigame M. Fundamental Physics and Promising Applications of Superionic Conductors // Jpn. J. Appl. Phys. – 1993. – V.32., Pt.1., No.2. – P.853-859.
3. Linford R.G., Hackwood S. Physical techniques for the study of solid electrolytes // Chem Rev. – 1981. – V.81, No.4. – P.327-364.

4. Huggins R.A. Some non-battery applications of solid electrolytes and mixed conductors // *Solid State Ionics*. – 1981. – V.5. – P. 15-20.
5. Укше Е.А., Вершинин Н.Н., Малов Ю.И. Функциональные элементы твердотельной электроники на суперионных проводниках // *Зарубежная радиоэлектроника*. – 1982. – №7. – С.53-67.
6. Aizu K. Possible Species of Ferro-magnetic, Ferroelectric and Ferroelastic Crystals // *Phys. Review B*. – 1970. – V.2, No.3. – P. 754-772.
7. Aizu K. Group-Theoretical Interpretation of Faintness Index for Ferroelectricity or Ferroelastictiy. II. Faintness Index of a Ferroic Phase // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1974. – V. 36, No.5. – P.1273-1279.
8. Aizu K. Considerations of Partially Ferroelastic and Partially Antiferroelastic Crystals and Partially Ferroelectric and Partially Antiferroelectric Crystals // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1970. – V.28, N.3. – P.717-722.
9. Aizu K. Determination of the State Parameters and Formulation of the Spontaneous Strain for Ferroelastics // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1970. – V.28, N.3. – P.706-716.
10. Haznar A., Pietraszko A., Studenyak I.P., X-ray Study of the Superionic Phase Transition in $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ // *Solid State Ionics* – 1999. – V.119, No.1-4. – P.31-36.
11. Studenyak I.P., Rushchanskii K.Z., Buchuk R.Yu., Stephanovich V.O. Phonon spectra of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ superionic ferroelastic: experimental and theoretical studies // *Condensed Matter Physics* – 2007. – V.10. – No.1(49). – P.11-16.
12. De Wolf P.M. Symmetry operations for displacively modulated structures. // *Acta Crystallogr. (A)*. – 1977. – V.33, No.3. – P.493-497.
13. Janssen J. On the lattice dynamics of incommensurate crystal // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1979. – V.12., No.24. – P.5381-5392.
14. Небола И.И., Хархалис Н.Р., Копцик А.В. Дисперсия фононного спектра сложных кристаллов типа NaCl в концепции сверхпространственной симметрии // *ФТТ*. – 1987. – Т.29, № 11. – С. 3223–3232.
15. Небола И.И., Хархалис Н.Р., Копцик А.В. Динамика решетки алмазоподобных полупроводников в концепции сверхпространственной симметрии // *ФТТ*. – 1990. – Т.32, №4. – С.972-979.
16. Небола И.И., Иваняс А.Ф., Киндрат В.Я. Генезис структуры и колебательных спектров кристаллов с $(S_a \times S_a \times S_a)$ сверхрешеткой // *ФТТ*. – 1993. – Т.35, №7. – С.1852-1866.
17. Ансельм А.И., Введение в теорию полупроводников, Изд. 2-е. – М.: Наука, 1978. – 616 с.

Стаття надійшла до редакції 3.12.2017.

И.И. Небола, А.Я. Штейфан, А.Ф. Катаница, И.П. Студеняк
Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ФОНОННЫЕ СПЕКТРЫ СЕМЕЙСТВА АРГИРОДИТОВ

На примере $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ рассмотрена кристаллическая структура семейства аргиродитов. В концепции сверхпространственной симметрии описана кристаллическая структура, представлены (3+3)-мерный базис, совокупность векторов модуляции и массовых модуляционных функций. Проведен расчет дисперсии фононного спектра, приведены дисперсионные зависимости

фононного спектра в високосимметрических направлениях ($\Gamma - X - M - R - \Gamma - M$) зоны Бриллюэна данного кристалла.

Ключевые слова: аргиродиты, кристаллическая структура, сверхрешетка, сверхпространственная симметрия, фононный спектр, Maple.

PACS 61.66.Fn

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.47-53

I.I. Nebola, A.Ya. Shteyfan, A.F. Katanytsia, I.P. Studenyak

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

PHONON SPECTRA OF ARGYRODITES FAMILY

Introduction: The compound $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ belongs to the large family of complex chalcogenides crystallizing in the argyrodite structures. At ambient temperature, the crystals under investigation are characterized by high symmetry: cubic syngony, space group $F\bar{4}3m$, lattice parameter $a = 9.708 \text{ \AA}$. The main peculiarity of the copper-containing argyrodites is high solid-state ionic conductivity of the Cu^+ ions, which makes it possible to use these argyrodite crystals as functional electronic materials.

Purpose: The main goal of the present work was to develop (within the superspace symmetry concept) the program suitable for theoretical calculation of the phonon spectra for the $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ argyrodites and to conduct the relevant calculations.

Methods: In the present study, the crystal structure of the $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ argyrodites have been analyzed and described by using the superspace symmetry concept.

Results: The program operating under the Maple environment and suitable for theoretically calculating the phonon spectra of the $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ argyrodite crystals has been developed. Zone structures have been calculated and presented for a series of model $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ phases. The eigenvalues of the generalized dynamic matrix have been found, and the dispersion dependencies have been built for the directions $\Gamma - X - M - R - \Gamma - M$ of the Brillouin zone.

Keywords: argyrodites, crystal structure, protocystal, phonon spectrum, Maple.

REFERENCES

1. Julien, C. (1990), "Technological application of solid state ionics", *Mater. Sci. Eng.: B.*, vol.6, no.1, pp.9-28.
2. Yugami, H. and Ishigame, M. (1993), "Fundamental Physics and Promising Applications of Superionic Conductors", *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol.32., pt.1., no.2, pp.853-859.
3. Linford, R.G. and Hackwood, S. (1981), "Physical techniques for the study of solid electrolytes", *Chem Rev.* vol.81, no.4, pp.327-364.
4. Huggins, R.A. (1981), "Some non-battery applications of solid electrolytes and mixed conductors", *Solid State Ionics*, vol.5, pp.15-20.
5. Ukshe, E.A., Vershinin, N.N. and Malov, Yu.I. (1982), "Functional elements of solid-state electronics on superionic conductors", *Zarubezhnaya radioelektronika*, no.7., pp.53-67.
6. Aizu, K. (1970), "Possible Species of Ferromagnetic, Ferroelectric and Ferroelastic Crystals", *Phys. Review B*, vol.2, no.3., pp. 754-772.
7. Aizu, K. (1974), "Group-Theoretical Interpretation of Faintness Index for Ferroelectricity or Ferroelasticity. II. Faintness Index of a Ferroic Phase", *J. Phys. Soc. Jpn.* vol.36, no.5, pp.1273-1279.
8. Aizu, K. (1970), "Considerations of Partially Ferroelastic and Partially Antiferroelastic Crystals and Partially Ferroelectric and Partially Antiferroelectric Crystals", *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol.28, no.3, pp.717-722.
9. Aizu, K. (1970), "Determination of the State Parameters and Formulation of the

- Spontaneous Strain for Ferroelastics”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol.28, no.3, pp.706-716.
10. Haznar, A., Pietraszko, A. and Studenyak, I.P. (1999), “X-ray Study of the Superionic Phase Transition in $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ ”, *Solid State Ionics*, vol.119, no.1-4, pp.31-36.
 11. Studenyak, I.P., Rushchanskii, K.Z., Buchuk, R.Yu., Stephanovich, V.O. (2007), “Phonon spectra of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ superionic ferroelastic: experimental and theoretical studies”, *Condensed Matter Physics*, vol.10, no.1(49), pp.11-16.
 12. De Wolf, P. M. (1977), “Symmetry operations for displacively modulated structures”, *Acta Crystallogr. (A)*, vol.33, no.3., pp.493-497.
 13. Janssen, J. (1979), “On the lattice dynamics of incommensurate crystal”, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, vol.12., no.24., pp.5381-5392.
 14. Nebola, I.I., Kharkhalis, N.R. and Koptsik, A.V. (1987), “The dispersion of the phonon spectrum of the complex NaCl-type crystals in the superspace symmetry concept” [“Dispersiya fononnogo spektra slozhnykh kristallov tipa NaCl v kontseptsii sverkhprostranstvennoy simmetrii”], *Solid State Physics [Fiz. Tv. Tel.]*, vol.29, no.11, pp.3223-3232.
 15. Nebola, I.I., Kharkhalis, N.R. and Koptsik, A.V. (1990), “Lattice dynamics of the diamond-like semiconductors in the superspace symmetry concept” [“Dinamika reshetkialmazopodobnykh poluprovodnikov v kontseptsii sverkhprostranstvennoy simmetrii”], *Solid State Physics [Fiz. Tv. Tel.]*, vol.32, no.4, pp. 972-979.
 16. Nebola, I.I., Ivanyas, O.F. and Kindrat, V.Y. (1993), “The genesis of the structure and vibrational spectra of crystals with the $(S_a \times S_a \times S_a)$ superlattice” [“Genesis struktury i kolebatel'nykh spektrov kristallov s $(S_a \times S_a \times S_a)$ - sverkhreshetkoy”], *Solid State Physics [Fiz. Tv. Tel.]*, vol.35, no.7, pp.1852-1866.
 17. Anselm, A.I. (1978), *Introduction to the theory of semiconductors*, 2nd ed. [Vvedenie v teoriyu poluprovodnikov, Izd. 2-e.], Nauka, Moscow, USSR.