

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Л. В. КИРЕНСКОГО

Препринт № 821Ф

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ
И СПЕКТР КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ
В ЭЛЬПАСОЛИТЕ Rb_2KScF_6 –
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Крылова С. Н., Втюрин А. Н., Белю А.,
Крылов А. С., Замкова Н. Г.

Красноярск 2003

Втюрин А. Н., Белю А., Крылов А. С., Крылова С.Н., Замкова Н.Г.

Динамика решетки и спектр комбинационного рассеяния в эльпасолите Rb_2KScF_6 – сравнительный анализ. Препринт № 821Ф. – Красноярск: Институт физики СО РАН, 2003. – 36 с.

Исследованы спектры комбинационного рассеяния света кристалла эльпасолита Rb_2KScF_6 в широкой области температур, включающей области двух фазовых переходов – из кубической в тетрагональную и затем – в моноклинную фазу. Выполнен сравнительный анализ экспериментального спектра КР и спектра колебаний решетки этих фаз, рассчитанного в рамках первопринципного подхода. Обнаружен и количественно проанализирован ряд аномалий, связанных с перестройкой структуры при переходах, как в области внутренних колебаний октаэдрических молекулярных ионов ScF_6 , так и низкочастотных колебаний решетки. Отмечается заметное взаимодействие низкочастотных внутренних колебаний с решеточными модами, а также сильное резонансное взаимодействие ротационных мягких мод, восстанавливающихся ниже точек фазовых переходов, с жесткими низкочастотными колебаниями подрешетки ионов рубидия, что существенно усложняет спектральную картину.

Raman spectra of Rb_2KScF_6 elpasolite crystal have been studied in a wide temperature range, including two transition points: from cubic to tetragonal, and then – to the monoclinic phase. Experimental spectra are compared with results of lattice dynamics simulations of these phases performed within *ab initio* approach. Several anomalies induced by transitional reconstruction of the crystal lattice were found both in the range of internal vibrations of ScF_6 molecular ions and lower frequency lattice vibrations, and their quantitative analysis has been performed. Noticeable interaction of lower frequency internal modes with lattice vibrations is pointed out, as well as strong resonance interaction of rotational soft modes restoring below transition points, with hard low frequency vibrations of rubidium ions sublattice, that complicates spectral picture considerably.

Рецензент
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Н. В. Волков

Введение

Перовскитоподобный кристалл Rb_2KScF_6 относится к семейству эльпасолитов $A_2B^{(1)}B^{(2)}X_6$, где A , B – катионы металлов либо более сложные молекулярные ионы, X – анионы кислорода либо галогенов [1]. Как правило, один из высокополяризуемых катионов образует достаточно жесткую октаэдрическую молекулярную группу BX_6 , и структуру кристалла можно представить как каркас этих октаэдров, разделенных катионами с хорошо локализованной электронной плотностью. Во многих случаях фазовые переходы в этих кристаллах оказываются связанными с изменениями этого каркаса: малыми разворотами этих октаэдров либо процессами их ориентационного упорядочения; в эксперименте это проявляется, в частности, в существенных аномалиях динамики решетки кристалла, в том числе, для переходов типа смещения – в конденсации мягких фононных мод [1–5].

Для кристалла Rb_2KScF_6 , в котором наблюдается последовательность фазовых переходов из кубической в тетрагональную и затем – в моноклинную фазу [6], ранее был выполнен неэмпирический расчет устойчивости этих структур и динамики их решетки [7,8], в результате которого было показано, что неустойчивость данных структур имеет фононную природу и механизм, по крайней мере, первого перехода связан с конденсацией оптического фонона, восстановление которого должно наблюдаться в низкосимметричных фазах. Выполненные направленные поиски проявления таких колебаний в спектрах комбинационного рассеяния (КР) первоначально не дали результатов [9] (также, как и в ряде других фтор-содержащих эльпасолитах [10]); впоследствии удалось обнаружить восстановление мягких фононных мод в этом кристалле [11,12], однако их число не соответствует ожидаемому на основании теоретико-группового анализа [13], и наблюдать их в экспериментальном спектре возможно только существенно ниже точки фазового перехода. В связи с этим в данной работе была поставлена задача – количественно проанализировать экспериментальные спектральные данные, осуществить их сравнительный анализ с результатами численных расчетов и установить причины наблюдаемых расхождений расчетных данных и эксперимента.

Структура и симметрия кристалла

Элементарную ячейку высокосимметричной кубической фазы альпасолита $A_2BB^3X_6$ можно представить как ячейку кубического перовскита с удвоенными параметрами, в которой ионы $B^{(1)}$ и $B^{(2)}$ регулярно чередуются вдоль трех осей координат. Структура элементарной ячейки (пространственная группа $Fm\bar{3}m$, $Z = 4$) показана на рис. 1.

При понижении температуры кристалл Rb_2KScF_6 испытывает последовательно два структурных фазовых перехода: при $T_1 = 252$ К из кубической в тетрагональную фазу (пространственная группа $I114/m$, $Z = 2$) и при $T_2 = 223$ К – в моноклинную (пространственная группа $P12_1/n1$, $Z = 2$) [6]. Вид предполагаемого искажения структуры, вызывающего первый фазовый переход и предсказанный на основании расчета [8], показан на рис. 2. Как видно из этого рисунка, он связан с поворотом жестких октаэдров ScF_6 .

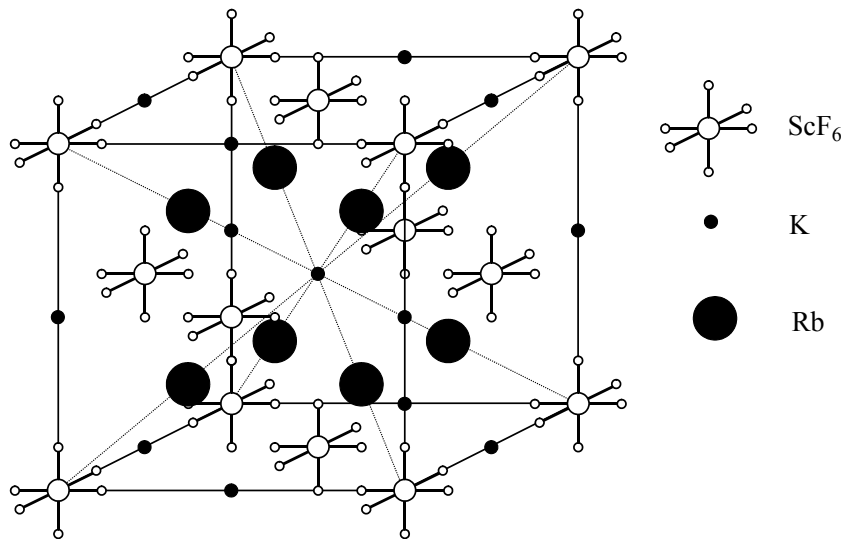


Рис. 1. Структура исходной кубической фазы кристалла Rb_2KScF_6 .

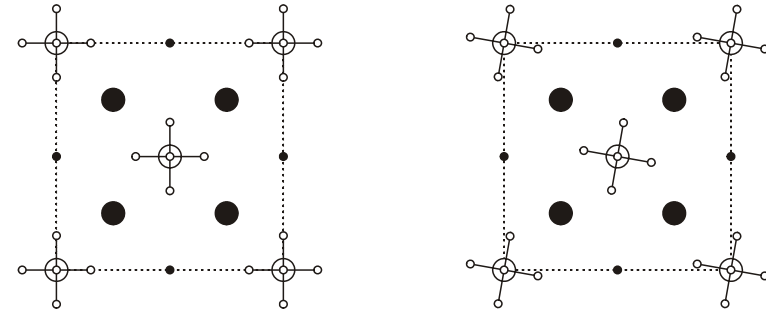


Рис. 2. Искажение решетки при переходе в тетрагональную фазу.

В высокосимметричной кубической фазе разложение колебательного представления в центре зоны Бриллюэна имеет вид:

$$\Gamma_{\text{колеб}}(Fm\bar{3}m) = A_{1g}(xx, yy, zz) + E_g(xx, yy, zz) + 2F_{2g}(xz, yz, xy) + F_{1g} + 5F_{1u} + F_{2u}. \quad (1)$$

В скобках показаны компоненты тензора КР, в которых активны соответствующие колебания. Если считать, что внутренние степени свободы октаэдра ScF_6 в кристалле слабо взаимодействуют с колебаниями решетки и остаются хорошо локализованными (что, по данным [10–13], справедливо), то в спектре КР кубической фазы активна единственная решеточная мода F_{2g} – остальные являются внутренними колебаниями этой группы. Поскольку симметрия свободного октаэдра совпадает с симметрией положения групп ScF_6 в кристалле, то симметрия и форма их внутренних колебаний в этом приближении должны остаться неизменными (см. [14]).

В тетрагональной фазе разложение колебательного представления в центре зоны имеет вид:

$$\Gamma_{\text{колеб}}(I4/m) = 3A_g(xx, yy, zz) + 3B_g(xx, yy, xy) + 3E_g(xz, yz) + 5A_u + B_u + 6E_u, \quad (2)$$

На рис. 3 показана корреляционная диаграмма колебаний (1) и (2).

Искажение структуры при первом фазовом переходе (рис. 2) преобразуется по трижды вырожденному неприводимому представлению F_{1g} . По нему же должна преобразовываться и мягкая мода выше точки перехода – неактивная в спектрах КР (а также в спектрах ИК поглощения).

Из корреляционной диаграммы рис. 3 следует, что ниже перехода в тетрагональную фазу можно ожидать снятия вырождения (расщепления) внутренних (E_g и F_{2g}) решеточного (F_{2g}) колебаний, а также расщепления и активации с спектре КР двух мягких мод.

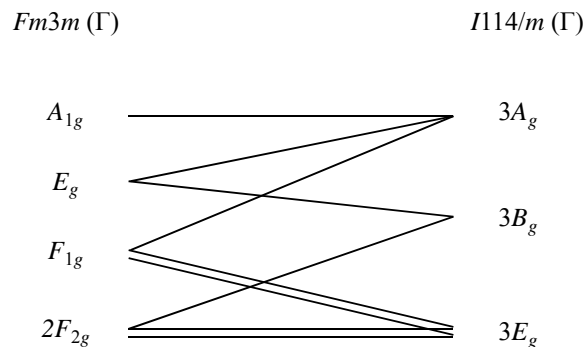


Рис. 3. Корреляционные диаграммы колебаний, активных в спектре КР кубической и тетрагональной фаз.

В низкосимметричной моноклинной фазе разложение колебательного представления группы симметрии имеет вид:

$$\Gamma_{\text{колеб}}(P12_1/n1) = 12A_g(xx, yy, zz, xy, yx) + 12B_g(xz, yz, zx, zy) + 18A_u + 18B_u, \quad (3)$$

Переход в моноклинную фазу сопровождается удвоением объема примитивной ячейки. Моды, соответствующие точке $X(0, 0, \pi/a)$, включая и возможную мягкую моду X_2^+ , неактивны в спектре КР, но их активация может наблюдаться ниже второй точки перехода (в том числе и восстановление мягкой моды). Корреляции колебаний, активных в спектре КР моноклинной фазы, с модами кубической фазы показаны на рис. 4. Как видно из этого рисунка, мода симметрии X_2^+ – единственная в данной структуре, и она соответствует повороту октаэдрических групп. Следует также ожидать дальнейшего расщепления вырожденных в тетрагональной фазе мод, в том числе – и восстанавливающейся мягкой моды перехода из кубической в тетрагональную фазу.

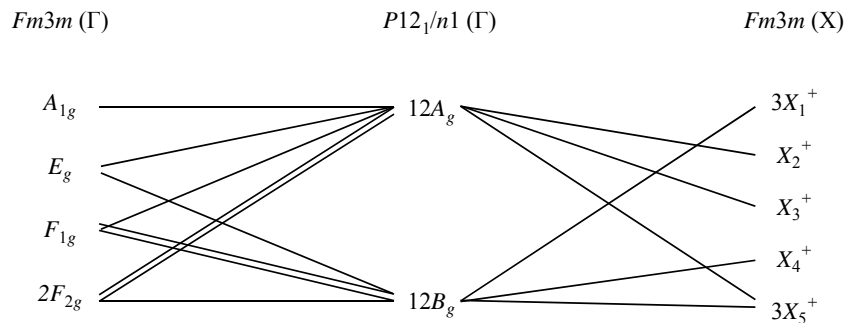


Рис. 4. Корреляционные диаграммы колебаний, активных в спектре КР кубической и моноклинной фаз.

Экспериментальные результаты и обсуждение

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для получения спектров КР в качестве источника возбуждения было использовано поляризованное излучение 514.5 нм Ar^+ лазера мощностью 500 мВт. Спектры в 180° геометрии были получены на спектрометре T-64000 (I.S.A., Jobin Yvon) с матричной регистрацией. Образцы для экспериментов размером $2 \times 2 \times 4 \text{ мм}^3$ были взяты из той же кристаллизации, что и в [6]; их ребра были ориентированы по кристаллографическим осям в кубической фазе. Исследованные образцы были оптически прозрачны, не содержали видимых в микроскоп окрашенных дефектов или включений. С целью максимального ослабления крыла упругого рассеяния для получения низкочастотных спектров использовался режим тройного монохроматора с вычитанием дисперсии; обрезание низких частот производилось от 8 см^{-1} ; для получения спектров внутренних колебаний с высоким разрешением (минимальным искажением контуров линий) – режим со сложением дисперсии. Спектральный размер ячейки регистрирующей матрицы в режиме вычитания дисперсии – $650/1024 \text{ см}^{-1}$, в режиме сложения дисперсии – $220/1024 \text{ см}^{-1}$, время накопления сигнала – 600 с. Точность стабилизации температуры образца во время съемки спектра не хуже 0.2 К. Диапазон температур, в котором проводилось исследование кристалла Rb_2KScF_6 : 50–600 К.

Определение параметров перекрытых контуров производилось с помощью программы SigmaPlot 5.0 с использованием дисперсионной формы контура; учитывалась поправка к температурной зависимости интенсивности рассеяния вида:

МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ ДАННЫХ

Для получения параметров спектральных линий экспериментальные данные обрабатывались с помощью программного пакета SigmaPlot 8.0 с использованием дисперсионной формы контура; учитывалась частотно-зависимая поправка к температурной зависимости интенсивности рассеяния вида:

$$I_s(\Omega_\alpha) \sim |Q_\alpha|^2 \sim n_\alpha + 1 = \frac{1}{1 - \exp(-\hbar\Omega_\alpha / k_B T)}. \quad (4)$$

Для корректного сопоставления экспериментальных спектров с результатами расчетов [7,8] и на основании этого сравнения –

определить собственные векторы наблюдаемых в спектре колебаний, необходимо было выполнить теоретико-групповой анализ собственных векторов расчетных колебаний решетки [15]. Симметричный анализ расчетного спектра включает в себя разложение собственных векторов динамической матрицы по базисным функциям неприводимых представлений пространственных групп симметрии, анализ собственных векторов динамической матрицы с целью выяснения формы колебания.

Задача разложения собственных векторов по базисным функциям неприводимых представлений решается с помощью операторов проектирования. Для этого строится полное колебательное представление определенной пространственной группы, и на основе этого представления вычисляются операторы проектирования [15]:

$$P_p = \frac{d_p}{g} \sum_{a \in G} \chi_p(a) P_a, \quad (5)$$

где d_p – размерность представления точечных операций симметрии, g – размерность пространственной группы симметрии, χ_p – характер матрицы представления точечной операции симметрии данного неприводимого представления a , P_a – колебательное представление операции симметрии данного неприводимого представления a группы G , P_p – оператор проектирования, суммирование проводится по всем элементам неприводимого представления a . Эти операторы используются, чтобы выделить из расчетных собственных векторов части, лежащие в пространствах представлений операции симметрии. Критерий для функций представлений позволяет определить, является ли функция f^a функцией неприводимого представления a группы G , то есть лежит ли она в пространстве данного представления [15]. Согласно этому критерию, функция только тогда является функцией неприводимого представления a группы G , когда

$$\sum_{a \in G} \chi_p(a) P_a f^a = \frac{g}{d_p} f^a. \quad (6)$$

В нашем случае функция f^a представляет собой собственный вектор динамической матрицы. Поскольку собственный вектор динамической матрицы преобразуется по одному неприводимому представлению, то найдя, для какого из представлений выполняется равенство (6), мы определяем, какому неприводимому представлению этот вектор соответствует. Таким образом, разложение собственных векторов динамической матрицы по базисным функциям неприводимых представлений пространственных групп позволяет определить степень вырождения и тип симметрии для каждого рассчитанного колебания. Алгоритм разложения собственных векторов динамической матрицы по

базисным функциям неприводимых представлений пространственных групп был реализован в программном пакете Mathematica 4.2.

СПЕКТР КР КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ

Спектр кристалла Rb_2KScF_6 в кубической фазе вдали от точки перехода представлен на рис. 5. В табл. 1 показаны результаты отнесения расчетных [7] мод кубической фазы по типам симметрии, в табл. 2 – сравнение экспериментальных частот с соответствующими им расчетными.

Число, частоты и поляризация спектральных линий в кубической фазе хорошо согласуются с наблюдавшимися ранее [9–13]. Линии хорошо поляризованы, что подтверждает высокое качество образца. Несколько заниженные значения расчетных частот, по отношению к экспериментальным, могут быть связаны с тем, что расчет ведется для условий, соответствующих абсолютному нулю температуры, где кубическая фаза неустойчива. Этим же объясняются и мнимые значения частот низколежащих колебаний.

В таблице 3 приведены примеры собственных векторов внутренних колебаний октаэдров ScF_6 . Для двух наиболее высокочастотных колебаний (390 и 505 см^{-1}), как и ожидалось, они соответствуют внутренним колебаниям свободных октаэдров ScF_6 (рис. 6).

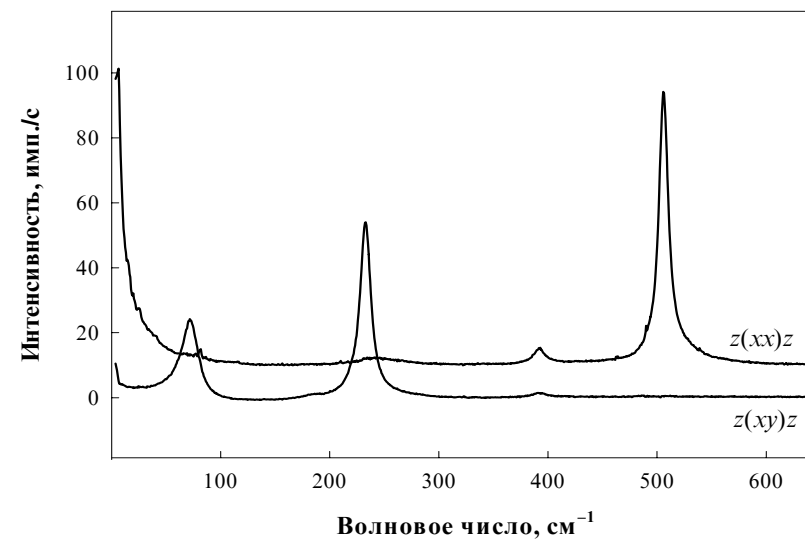


Рис. 5. Спектр кристалла Rb_2KScF_6 в кубической фазе ($T = 300 \text{ K}$).

Таблица 1.

Разложение частотного спектра в центре зоны Бриллюэна по типам колебаний в кубической фазе

Вырождение	Тип колебания	Частота (см^{-1}) [7]
3	F_{1g}	66i
2	F_{1u}	34i
3	F_{2g}	26i
3	F_{1u}	0
1	F_{1u}	80
3	F_{2u}	99
2	F_{1u}	135
3	F_{2g}	152
1	F_{1u}	164
2	F_{1u}	185
1	F_{1u}	189
2	E_g	343
1	A_{1g}	402
2	F_{1u}	404
1	F_{1u}	462

Примечание: жирным выделено представление ожидаемой мягкой моды.

Таблица 2.

Частоты колебаний (см^{-1}), активных в спектре КР кубической фазы

Вырождение	Тип колебания	Расчет	Эксперимент
3	F_{2g}	26i	89
3	F_{2g}	152	230
2	E_g	342	390
1	A_{1g}	401	505

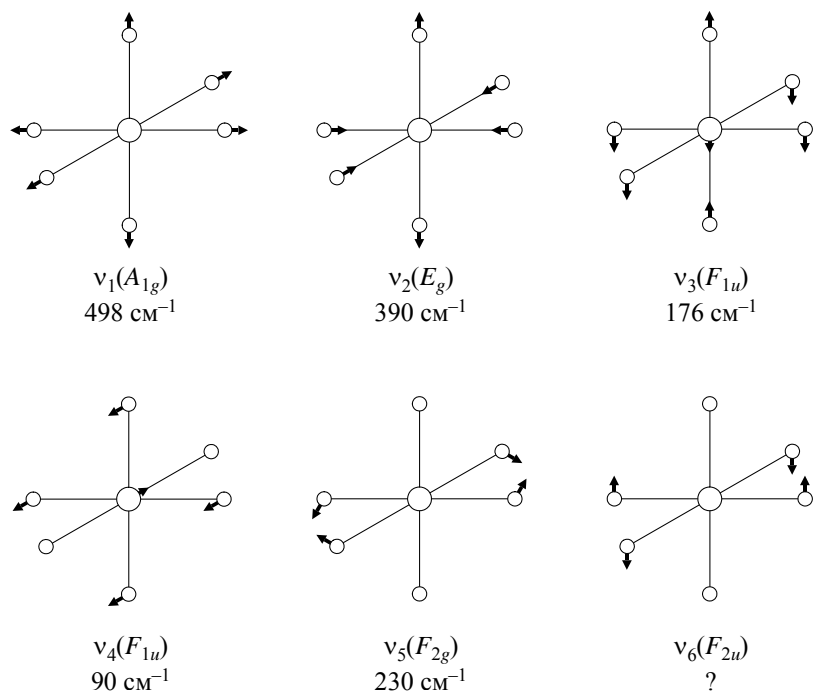


Рис. 6. Формы и частоты внутренних колебаний свободной группы ScF_6
 (по данным [14]).

В то же время низкочастотное внутреннее колебание октаэдрического иона и решеточная мода колебаний подрешетки ионов рубидия (оба – симметрии F_{2g}) оказываются заметно перемешанными (несмотря на достаточно большое различие частот их колебаний (230 cm^{-1} и 89 cm^{-1})). Это свидетельствует о наличии заметного взаимодействия решеточных и внутримолекулярных степеней свободы уже в высокосимметричной кубической фазе.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВНУТРЕННИХ КОЛЕБАНИЙ

Корреляционные диаграммы ожидаемых в спектре КР внутренних мод приведены на рис. 7.

Как видно из этого рисунка, в области самого высокочастотного полно-симметричного колебания группы ScF_6 можно ожидать появления дополнительной линии, приходящей с границы зоны Бриллюэна ниже перехода в моноклинную фазу.

Трансформация спектра в соответствующей области частот показана на рис. 8, температурные зависимости частот и полуширин наблюдаемых здесь линий – на рис. 9.

На рис. 8 ясно видно появление дополнительной линии в этой части спектра при низких температурах, что хорошо согласуется с правилами отбора (см. корреляционную диаграмму на рис. 7). Наблюдается заметное изменение характера температурной зависимости частоты в точках фазовых переходов. Экстраполяция температурного хода частоты в кубической фазе известной зависимостью [12,13] (показана на рис. 9)

$$\Omega_{\alpha}(T) = \Omega_{\alpha}(0) \exp(-3\gamma_{\alpha} a T), \quad (7)$$

дает произведение параметра Грюнайзена на коэффициент теплового расширения $\gamma_{\alpha} a \approx 0.2 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$; экстраполированное к нулю значение частоты равно 518 см^{-1} . Столь малое полученное значение параметра Грюнайзена, даже с учетом его зависимости от частоты

$$\gamma_{\alpha} = \frac{B_T}{\Omega_{\alpha}} \left(\frac{d\Omega_{\alpha}}{dP} \right)_T \quad (8)$$

указывает на слабое влияние ангармонизма на это колебание (Ω_{α} – частота данного колебания, B_T – изотермический объемный модуль сжатия, P – гидростатическое давление).

Сдвиг частоты относительно экстраполированного значения ниже точки перехода в тетрагональную фазу показан на рис. 10.

Небольшой дополнительный сдвиг частоты появляется еще в кубической фазе, в довольно широкой (порядка 50 K) предпереходной области; он монотонно растет в тетрагональной фазе и становится практически линейным в моноклинной, что соответствует фазовому переходу второго рода или близкому к нему.

Внутренние колебания ScF₆

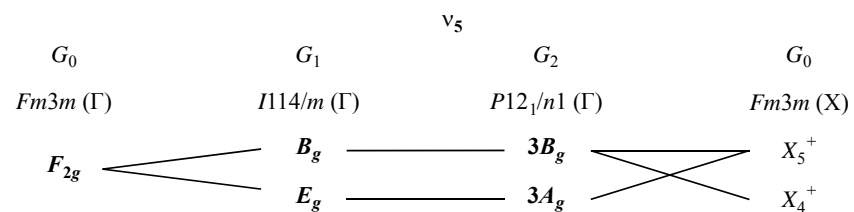
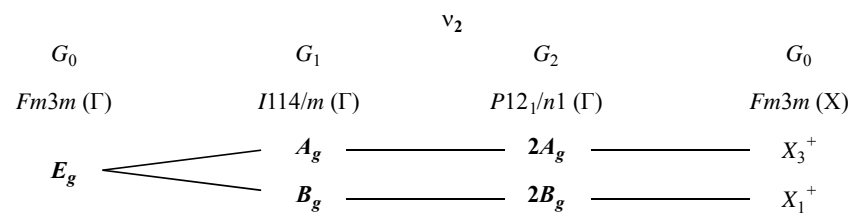
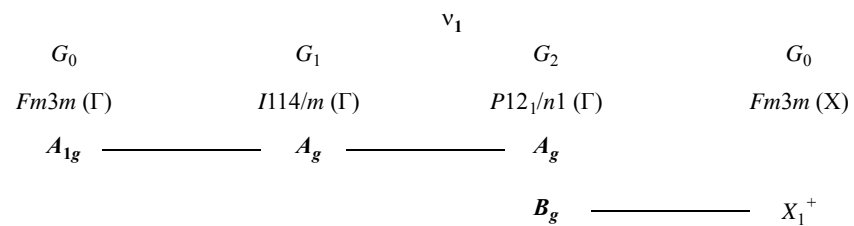


Рис. 7. Корреляционные диаграммы активных в спектрах КР внутренних колебаний групп ScF₆. Выделены колебания, проявление которых в спектре разрешено правилами отбора.

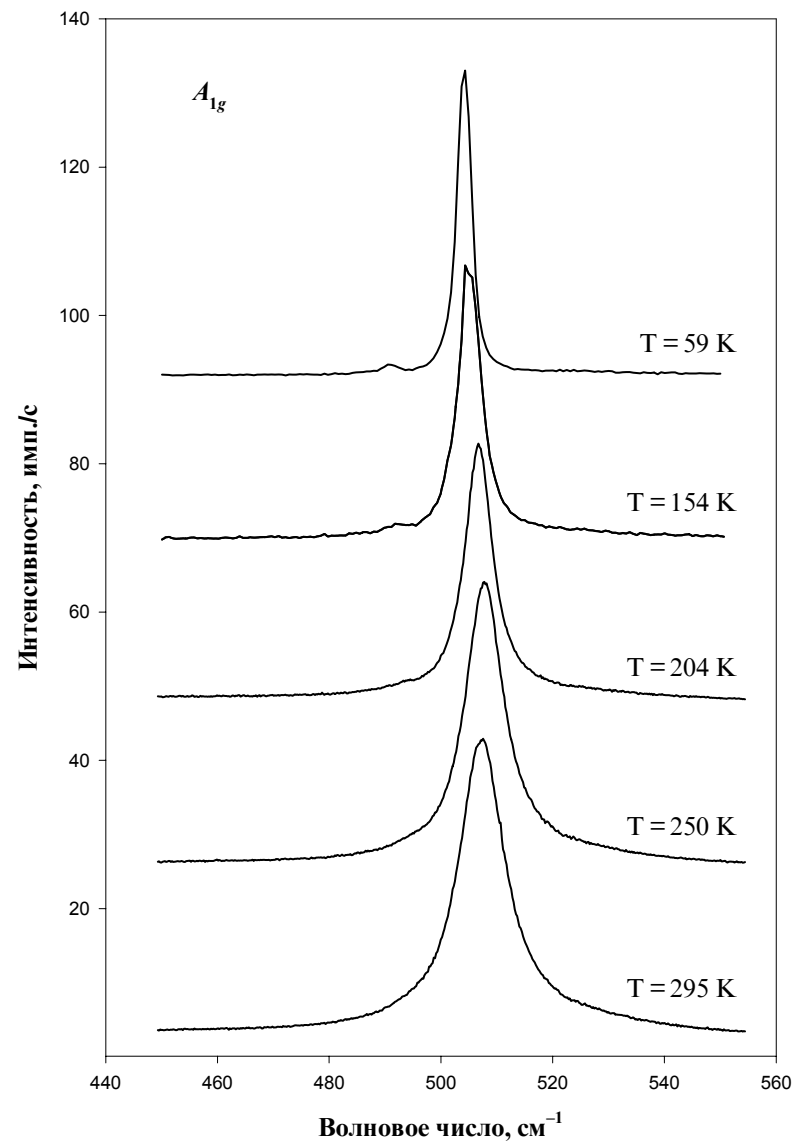


Рис. 8. Трансформация спектра в области полностью симметричного внутреннего колебания с температурой.

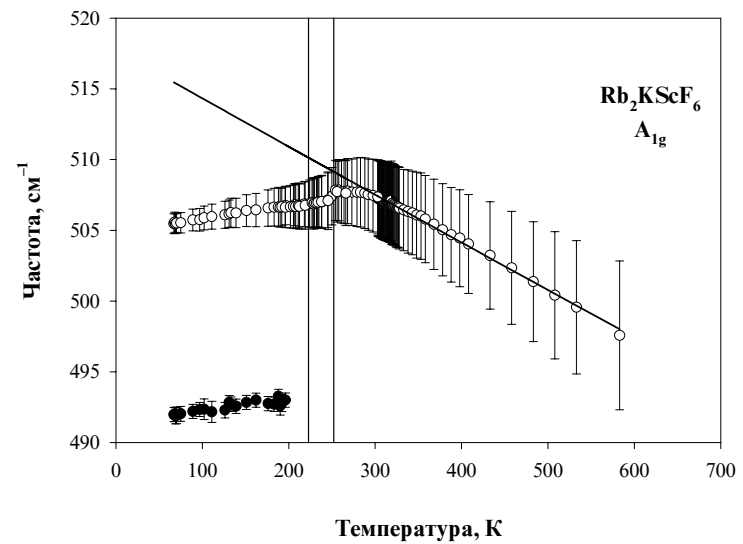


Рис. 9. Температурные зависимости частот линий, соответствующих полностью симметричному внутреннему колебанию. Вертикальными линиями показаны их полуширины (HWHH).

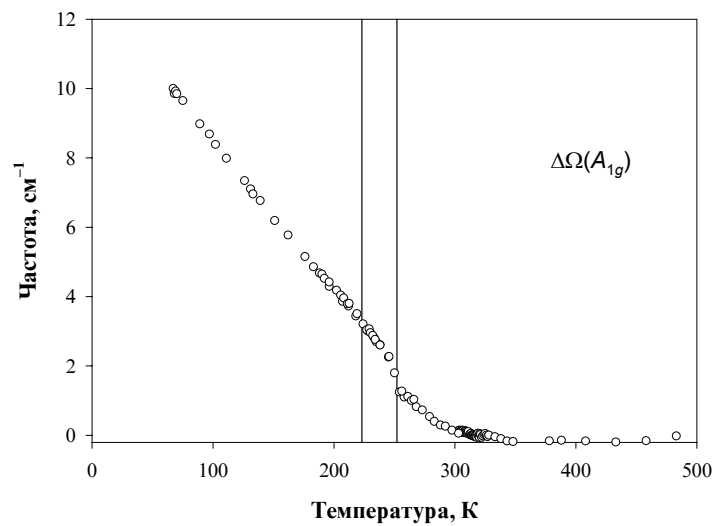


Рис. 10. Температурная зависимость сдвига частоты полностью симметричного внутреннего колебания относительно экстраполированного значения.

Полуширина этой линии также испытывает заметные изменения с температурой. Ее температурная зависимость приведена на рис. 11; кривая на рисунке – результат экстраполяции значений полуширины в кубической фазе выражением

$$\sigma(\Omega_\alpha, T) = \sigma(\Omega_\alpha, 0) \left(1 + \frac{1}{\exp(\hbar\Omega_{\beta 1} / k_B T) - 1} + \frac{1}{\exp(\hbar\Omega_{\beta 2} / k_B T) - 1} \right), \quad (9)$$

для уширения линии за счет распада на два фонона [17]. Видно, что экспериментальная зависимость хорошо описывается этим выражением, что свидетельствует об отсутствии существенных вкладов других механизмов уширения линии – например, структурной разупорядоченности кристалла в высокотемпературной фазе. Полученное в результате экстраполяции значение частоты фонона, участвующего в распаде этого внутреннего колебания, $\Omega_{\beta 1} \approx 413 \text{ см}^{-1}$, $\Omega_{\beta 2} = \Omega_\alpha - \Omega_{\beta 1}$, что отвечает распаду на два оптических фонона, один из которых близок по частоте к внутреннему колебанию ν_2 , а второй попадает в область высокочастотных колебаний решетки; экстраполированное к нулевой температуре значение полуширины равно 0.9 см^{-1} .

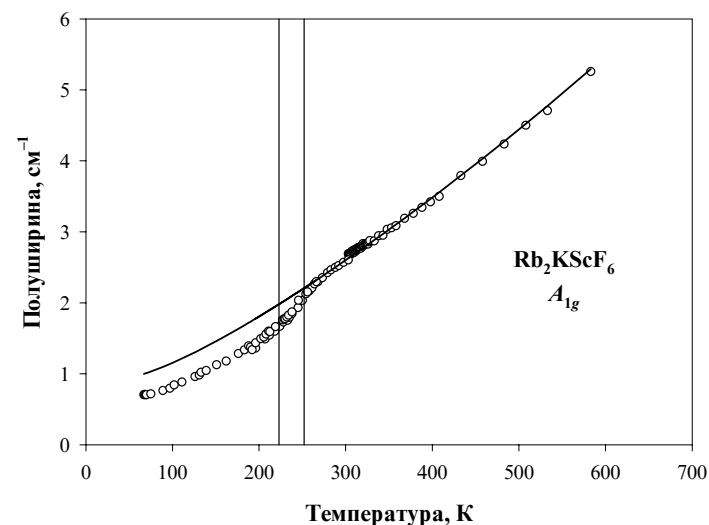


Рис. 11. Температурная зависимость полуширины (HWHH) линии ν_1 . Кривая – результат экстраполяции выражением (9).

Как видно на рис. 5, внутреннее колебание ν_2 имеет в кубической фазе крайне малую интенсивность; поэтому зафиксировать его расщепление ниже точек переходов достаточно уверенно не удастся. Температурная зависимость его частоты также хорошо описывается выражением вида (7), при этом полученное значение $\gamma_{\alpha a} \approx 0.4 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ соответствует несколько большей величине параметра Грюнайзена (т. е. большему ангармонизму колебания); экстраполированное к нулю значение частоты равно 407 см^{-1} .

Температурные зависимости частот и полуширин линий, обнаруженных в области внутреннего колебания ν_5 , показаны на рис. 12. Количество обнаруженных здесь линий соответствует правилам отбора (рис. 7), а их положение качественно согласуется с результатами расчетов [7].

Значение частоты наиболее интенсивной в этой области линии 232 см^{-1} в кубической фазе остается практически постоянным, что свидетельствует о компенсации вкладов теплового расширения и фонон-фононного взаимодействия в температурную зависимость частоты. Ниже перехода из кубической в тетрагональную фазу наблюдается непрерывное изменение ее частоты и расщепление в дублет, При достижении перехода в моноклинную фазу частоты изменяются скачком, и происходит их дальнейшее расщепление.

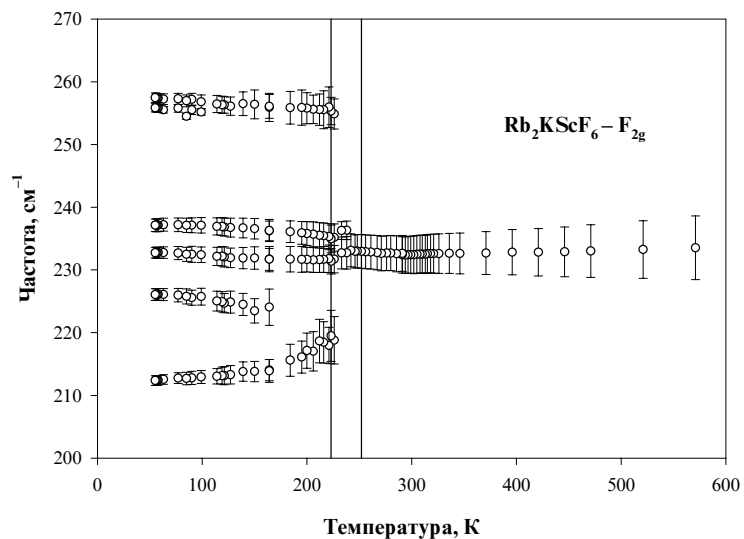


Рис. 12. Температурная зависимость частот линий в области внутреннего колебания ν_5 . Вертикальными линиями показаны их полуширины (HWHH).

Непрерывное изменение спектра при первом переходе и скачкообразное – при втором согласуется с данными [6] по термодинамике этих переходов. Интенсивности линий, появляющихся в моноклинной фазе и соответствующих границе зоны Бриллюэна кубической фазы, очень малы и часть из них удается наблюдать только существенно ниже перехода в моноклинную фазу.

Аппроксимация температурного хода полуширины линии 232 см^{-1} зависимостью вида (9) дает экстраполированное к $T = 0$ значение 0.1 см^{-1} и частоту фонона, образующегося при распаде, равную 224 см^{-1} , что соответствует распаду на оптический и акустический фононы с границы зоны Бриллюэна.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ

Трансформация спектра решеточных колебаний с температурой показана на рис. 13. Спектр можно разбить на две части: выше и ниже 60 см^{-1} . Более высокочастотный участок соответствует устойчивым (жестким) решеточным модам колебаний подрешетки ионов рубидия – с небольшой примесью низкочастотной внутренней деформационной моды колебания ионов ScF_6 (собственный вектор этой моды приведен в табл. 4; там же приведен собственный вектор мягкой моды кубической фазы, неактивной в спектре КР). Здесь наблюдается медленный рост частоты решеточной моды (89 см^{-1} при комнатной температуре), которая после первого перехода расщепляется на две; ниже второй точки перехода происходит дальнейшее ее расщепление, и при более глубоком охлаждении появляются дополнительные малоинтенсивные линии. Температурные зависимости частот и ширины этих линий показаны на рис. 14.

Таблица 4.

Примеры собственных векторов для решеточных мод кубической фазы

Жесткая мода F_{2g} $\Omega = 89 \text{ cm}^{-1}$			Мягкая мода F_{1g} $\Omega = 66i \text{ cm}^{-1}$			
	x	y	z	x	y	z
Rb	0.35	-0.52	0.18	0	0	0
Rb	-0.35	0.52	-0.18	0	0	0
K	0	0	0	0	0	0
Sc	0	0	0	0	0	0
F	-0.16	0.10	0	0.39	0.08	0
F	0.16	-0.10	0	-0.39	-0.08	0
F	0	-0.05	0.16	0	0.31	0.39
F	0	0.05	-0.16	0	-0.31	-0.39
F	0.05	0	0.10	0.31	0	-0.08
F	-0.05	0	-0.10	-0.31	0	0.08

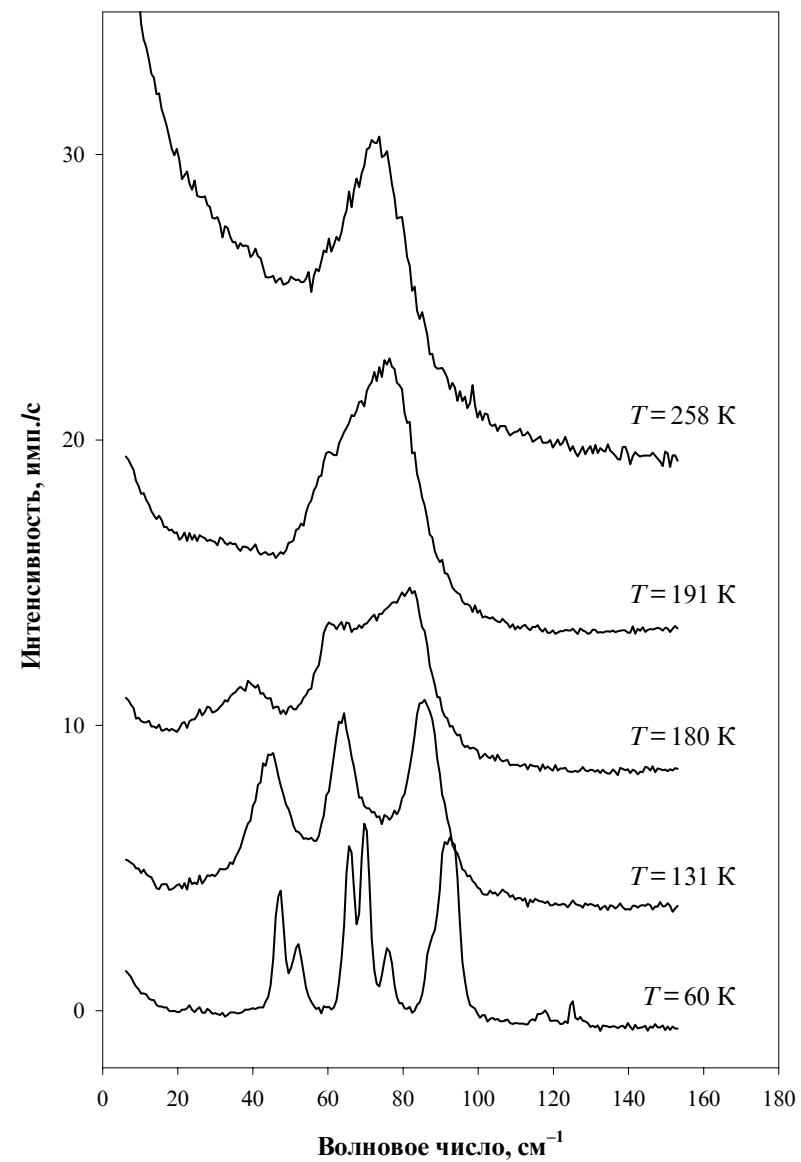


Рис. 13. Трансформация спектра решеточных колебаний Rb₂KScF₆ с температурой.

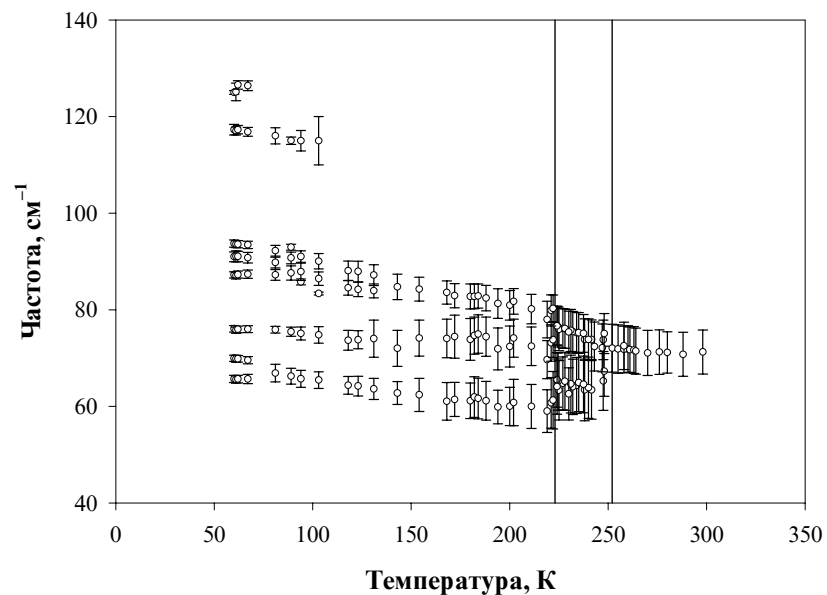


Рис. 14. Температурные зависимости частот жестких решеточных мод Rb_2KScF_6 . Вертикальными линиями показаны ширины (HWHH) линий.

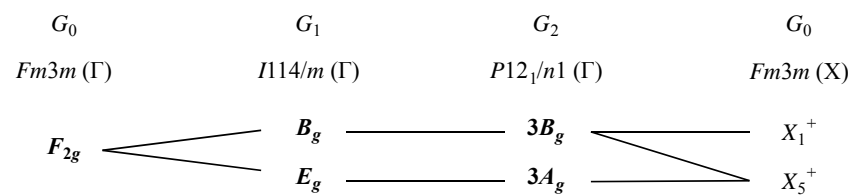
Общее количество обнаруженных в этом диапазоне линий соответствует правилам отбора (см. корреляционную диаграмму на рис. 15).

Отметим, что сразу после переходов наблюдается появление новых линий, связанное со снятием вырождения колебаний высокосимметричных фаз. В то же время дополнительные линии, обусловленные удвоением объема элементарной ячейки, появляются существенно ниже точек фазовых переходов. Как возможное объяснение этого факта можно предположить, что при фазовых переходах заметно перестраивается динамика кристалла – это приводит к сдвигам и расщеплениям линий, активных в спектре высокосимметричной фазы. В то же время производные восприимчивости кристалла по атомным смещениям меняются слабо, и запрещенные ранее колебания с границы зоны Бриллюэна остаются

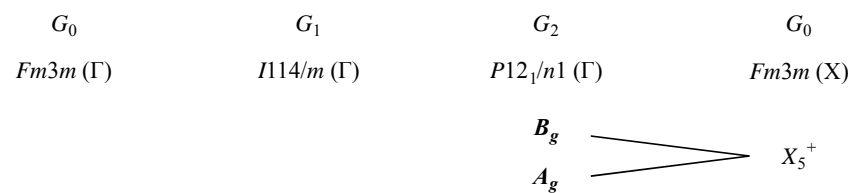
малоинтенсивными до тех пор, пока их собственные вектора не искажутся достаточно сильно.

Решеточные колебания

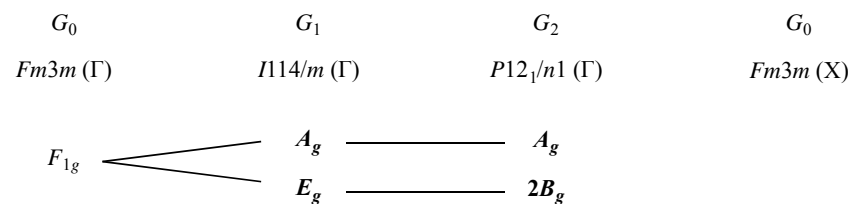
Высокочастотные (жесткие) моды
Смещения Rb^+



Повороты ScF_6^{3-}



Мягкие моды перехода $G_0 - G_1$: повороты ScF_6^{3-}



Мягкие моды перехода $G_1 - G_2$: повороты ScF_6^{3-}

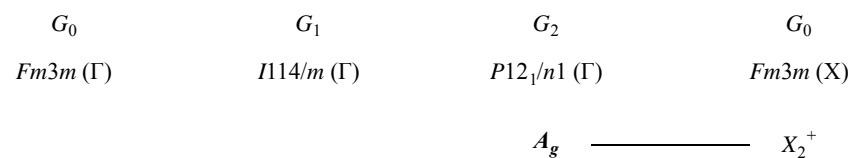


Рис. 15. Корреляционные диаграммы активных в спектрах КР решеточных колебаний. Выделены колебания, проявление которых в спектре разрешено правилами отбора.

В самой низкочастотной части спектра ($<60 \text{ см}^{-1}$) при понижении температуры за несколько градусов до точки перехода наблюдается рост интенсивности и уширение центрального пика рассеяния. Ниже точки T_1 вблизи центрального пика возникает широкое крыло, которое может быть интерпретировано как возгорание малоинтенсивной широкой полосы (рис. 15); при более низких температурах на ней можно выделить два максимума, 26 см^{-1} и 39 см^{-1} . На рис. 15 показана температурная зависимость квадрата частот максимумов выделенных линий.

В пределах тетрагональной фазы заметных сдвигов частот этих линий не наблюдается (ввиду уровня шумов, сравнимого с интенсивностью линий, точность определения их положений, разумеется, невелика); можно отметить лишь некоторую «перекачку» интенсивности в более высокочастотную часть этой полосы с понижением температуры и снижение интенсивности центрального пика, возможно, связанное с перестройкой доменной структуры.

При достижении точки второго перехода наблюдается скачкообразное возрастание интенсивности упругого рассеяния, и перераспределение интенсивности обнаруженной полосы – заметно возрастает ее высокочастотная часть. Частота этого максимума монотонно растет при охлаждении; температурная зависимость квадрата частоты близка к линейной, что характерно для мягких мод, связанных с фазовыми переходами типа смещения – второго рода, либо первого, близкого ко

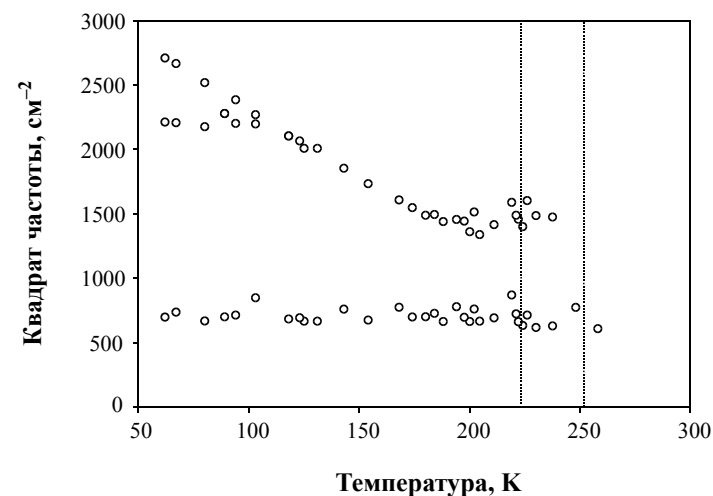


Рис. 15. Температурная зависимость квадратов частот обнаруженных низкочастотных решеточных колебаний.

второму. Ниже 100 К, где, ввиду малого при этих температурах ангармонизма, линии сильно сужаются, наблюдается расщепление этого максимума на два. При дальнейшем понижении температуры высокочастотная компонента образовавшегося дублета продолжает сдвигаться вверх, тогда как низкочастотная остается практически на месте ($47\text{--}48\text{ см}^{-1}$).

Положение самого низкочастотного максимума также остается практически неизменным ($23\text{--}27\text{ см}^{-1}$). Его интенсивность медленно падает, и ниже 100 К его уже с трудом можно выделить на фоне шумов.

Полученные спектры колебаний решетки по количеству линий согласуются с правилами отбора (см. корреляционную диаграмму на рис. 8). Согласно этой диаграмме, ниже T_1 должны восстанавливаться две моды, образовавшиеся в результате конденсации и частичного расщепления ранее неактивного в спектре фонона F_{1g} – который до перехода соответствовал ротационным колебаниям октаэдрических групп (табл. 4). По аналогии с жесткими решеточными модами можно ожидать, что их интенсивность будет достаточно малой. После второго перехода они должны расщепиться далее, образовав триплет (симметрия соответствующих колебаний в моноклинной фазе – $A_g + 2B_g$). Одновременно должна начать восстанавливаться мягкая мода этого перехода, имеющая в моноклинной фазе также симметрию A_g , и также соответствующая в высокотемпературной фазе повороту октаэдрических групп. Наличие в спектре низкочастотных жестких мод колебаний подрешетки рубидия этой же симметрии (расчетные частоты и собственные векторы всех решеточных колебаний моноклинной фазы даны в Приложении) приводит к их резонансному взаимодействию с восстанавливающимися мягкими модами, что сопровождается сильным перемешиванием их собственных векторов – до тех пор, пока самая высокочастотная компонента «мягкого» мультиплета не уйдет в область достаточно высоких частот, где ее и удается наблюдать в экспериментальном спектре. Отметим, что, согласно расчетам динамики моноклинной фазы при $T = 0$ [7], частоты двух нижайших колебаний в спектре равны 22 и 31 см^{-1} , что хорошо согласуется с экспериментально полученным положением низкочастотного максимума ($23\text{--}27\text{ см}^{-1}$) – в то же время собственный вектор этих колебаний представляет собой суперпозицию поворотов жестких групп ScF_6 (без их искажения) и смещений ионов рубидия (см. Приложение).

Выводы

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что фазовые переходы в Rb_2KScF_6 сопровождаются восстановлением мягких фононных мод; это позволяет отнести их к переходам типа смещения [8,9]; каких-либо аномалий динамики решетки высокосимметричной фазы, связанных с процессами ее разупорядочения, не наблюдалось. Как показывает теоретико-групповой анализ, собственные вектора обеих мягких мод выше точек перехода связаны с разворотом октаэдрических молекулярных ионов ScF_6^{+} . Ниже перехода в моноклинную фазу наблюдается сильное взаимодействие восстанавливающихся ротационных мягких мод со смещениями ионов рубидия, что приводит к модификации температурного хода частот фононов, перемешиванию их собственных векторов и, в целом, усложняет спектральную картину.

Обнаружены и интерпретированы аномалии температурных зависимостей параметров жестких решеточных мод и внутренних колебаний групп KScF_6 ; их количественный анализ подтверждает отнесение перехода в тетрагональную фазу ко второму роду, и в моноклинную – к первому роду, близкому ко второму. Малые значения полуширин линий и их температурные зависимости подтверждают, что затухание колебаний в высокосимметричной фазе определяется распадом фононов за счет их ангармонизма и не связано с наличием беспорядка в структуре, за исключением, возможно, предпереходной области.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность К. С. Александрову, И. Н. Флерову, В. И. Зиненко за предоставленные образцы и полезное обсуждение результатов. Работа выполнена при поддержке гранта ККФН-РФФИ «Енисей-2002» 02-02-97707 и интеграционного проекта СО РАН № 88.

Литература

1. Александров К. С., Безносиков Б. В. Перовскитоподобные кристаллы. Новосибирск: Наука, 1997.
2. Buhner W., Gudel H. U. J. Soft Rotatory Mode and Structural Phase Transition in the Rare-Earth Bromo-Elpasolites $\text{Cs}_2\text{NaReBr}_6$. Phys. C, 1987, v. 20, no 25, pp. 3809–3827.
3. Knudsen G. P. Soft Mode and Structural Phase Transition in the Cubic Elpasolite $\text{Cs}_2\text{NaNdCl}_6$. Solid State Commun., 1984, v. 49, no 7, pp. 1045–1048.
4. Prokert F., Aleksandrov K. Neutron Scattering Studies on the Phase Transition and Phonon Dispersion in $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$. S. Phys. Status Solidi, 1984, v. b124, no 2, pp. 503–515.
5. Baldinozzi G., Sciau Ph., Bulou A. Raman Study of the Structural Phase Transition in the Ordered Perovskite Pb_2MgWO_6 . J. Phys. Condens. Matter., 1995, v. 7, no 10, pp. 8109–8117.
6. Флеров И. Н., Горев М. В., Мельникова С. В., Мисюль С. В., Воронов В. Н., Александров К. С. Фазовые переходы в эльпасолите Rb_2KScF_6 . ФТТ, 1992, т. 34, № 7, с. 2185–2195.
7. Зиненко В. И., Замкова Н. Г. Динамика решетки кристалла Rb_2KScF_6 в нестабильной кубической и тетрагональной фазах и стабильной моноклинной фазе. ФТТ, 19996 т. 41, № 7, с. 1297–1305.
8. Зиненко В. И., Замкова Н. Г. Теория структурного фазового перехода $Fm\bar{3}m \rightarrow I4/m$ в кристалле Rb_2KScF_6 . ЖЭТФ, 2000, т. 118, № 2, с. 359–373.
9. Flerov I. N., Gorev M. V., Aleksandrov K. S., Tressaud A., Grannec J., Cousi M. Phase Transitions in Elpasolites (Ordered Perovskites). Mater. Sci. Eng., 1998, v. R24, no 3, pp. 79–152.
10. Cousi M., Khairoun S., Tressaud A. Structural Phase Transitions in $\text{Rb}_2\text{KM}^{\text{III}}\text{F}_6$ Elpasolites. Phys. Stat. Sol., 1986, v. a98, no 1, pp. 423–433.
11. Втюрин А. Н., Белю А., Крылов А. С., Воронов В. Конденсация мягких мод в спектрах комбинационного рассеяния эльпасолита Rb_2KScF_6 . Физика твердого тела, 2001, т. 43, № 11, с. 2066–2069.
12. Крылов А. С., Втюрин А. Н., Воронов В. Н., Белю А. Комбинационное рассеяние и фазовые переходы в эльпасолите Rb_2KScF_6 . XVI Всероссийская конференция по физике сегнетоэлектриков ВКС-XVI-2002. Тезисы докладов. Тверь, 2002. – с. 96.
13. Втюрин А. Н., Белю А., Крылов А. С., Воронов В. Н. Спектр комбинационного рассеяния и фазовые переходы в эльпасолите Rb_2KScF_6 . Препринт № 815Ф, Красноярск: ИФ СО РАН, 2002.
14. Nakamoto K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. Wiley, New York etc., 1991.
15. Штрайтвольф Г. Теория групп в физике твердого тела. Москва: Мир, 1971.
16. Balkanski M., Wallis R. F., Haro E. Anharmonic Effects in Light Scattering due to Optical Phonons in Silicon. Phys. Rev., 1983, v. B28, no 4, pp. 1928–1933.
17. Gonzalez J., Moya E., Chervin J. C. Anharmonic Effects in Light Scattering Due to Optical Phonons in CuGaS_2 . Phys. Rev., 1996, v. B54, no. 7, pp. 4707–4713.

ПРИЛОЖЕНИЕ
НОРМАЛЬНЫЕ МОДЫ КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ Rb₂KScF₆
В МОНОКЛИННОЙ ФАЗЕ

A _g	Ω, cm ⁻¹	22	31	37	69	84	93	149	155	160	269	272	345
Rb	X	-0.0821	0.3708	-0.1162	-0.2099	-0.136	0.00870	0.0006	-0.1531	0.00523	-0.002	0.00458	-0.0002
	Y	0.2701	-0.0651	-0.3951	0.0211	-0.098	0.10263	0.0335	-0.0152	-0.0271	0.0035	0.00283	-0.0016
	Z	0.3422	0.1491	0.2301	0.0109	-0.134	0.04387	-0.1419	0.01063	-0.0686	-0.002	-0.0039	0.0038
Rb	X	0.0822	0.3989	-0.1323	-0.2259	-0.136	0.01035	0.0004	-0.1526	-0.0046	-0.002	0.00471	0.0002
	Y	0.2631	0.0812	0.3932	0.0042	0.0981	-0.0987	-0.0358	0.01626	0.01682	-0.003	-0.0030	-0.0001
	Z	0.3433	0.1288	0.2422	-0.0581	-0.1403	0.02070	-0.1426	0.00986	-0.0979	-0.003	-0.0024	-0.0042
Rb	X	0.0895	-0.4049	0.1501	0.2226	-0.0871	-0.0257	-0.0006	0.15788	0.00677	0.0028	-0.0047	-0.0010
	Y	0.2406	-0.0773	-0.3952	0.0003	-0.0801	0.1001	0.0368	-0.0163	-0.0170	0.0029	0.00305	-0.0004
	Z	0.3661	-0.1349	0.05655	0.1382	-0.0201	0.1423	-0.0092	0.09844	0.0036	0.00285	0.0044	
Rb	X	0.0762	-0.3755	0.1000	0.24161	-0.0814	-0.0117	-0.0002	0.15530	-0.0037	0.0030	-0.0048	0.0009
	Y	-0.2501	0.1122	0.3960	-0.0137	0.0782	-0.1005	-0.0338	0.01520	0.02703	-0.002	-0.0030	0.0004
	Z	-0.3672	-0.1149	-0.240	-0.0121	0.1324	-0.0440	0.14098	-0.0099	0.06914	0.0026	0.00432	-0.0035
F	X	-0.0141	-0.0279	-0.0293	-0.2463	-0.1262	-0.1985	0.0511	0.33180	-0.0581	0.0263	-0.0435	0.0483
	Y	0.1374	0.0025	-0.0713	-0.0291	0.2643	-0.1867	-0.2450	0.02538	0.17400	-0.001	-0.0096	0.0101
	Z	0.0010	0.0052	0.0030	0.0335	0.0163	0.0344	-0.0028	-0.0425	-0.0043	0.2311	-0.3337	0.3164
F	X	-0.0619	-0.1208	-0.0043	-0.1820	0.0614	0.1141	-0.1632	-0.0015	-0.1427	-0.127	-0.2759	-0.2736
	Y	-0.0561	-0.1239	-0.0023	-0.2050	0.0991	0.1544	-0.1735	0.03533	-0.2049	0.1072	0.22807	0.2170
	Z	-0.0623	-0.1675	0.011	-0.1035	-0.251	-0.0912	-0.1760	-0.2375	0.23593	0.0199	0.03134	0.0296
F	X	0.0580	-0.0539	0.0826	-0.1550	0.0739	0.2055	0.15319	0.00989	0.21198	-0.248	-0.0363	0.1164
	Y	0.0550	-0.0588	0.0760	-0.1438	0.0570	0.1177	0.13962	-0.0160	0.14345	0.3165	0.04287	-0.1511
	Z	-0.0970	0.1182	-0.044	0.1467	-0.111	0.2386	-0.1863	0.22959	0.25387	0.0371	0.01209	-0.0103
F	X	-0.0226	-0.0054	-0.0478	-0.2117	-0.132	-0.2406	0.04922	0.33136	0.07181	0.0247	-0.0395	0.0359
	Y	-0.1459	-0.0150	0.0708	0.0845	-0.261	0.1894	0.24005	-0.0241	-0.2122	0.0034	0.01139	-0.0076
	Z	0.0009	0.0052	0.0046	0.0282	0.0186	0.0408	-0.0027	-0.0446	-0.0073	0.2229	-0.3199	0.2521
F	X	-0.0678	-0.1029	-0.0121	-0.1419	0.0681	0.1237	-0.1611	-0.0031	-0.1186	-0.118	-0.2940	-0.1688
	Y	0.0572	0.1094	0.0049	0.1708	-0.1042	-0.1677	0.1710	-0.0336	0.16656	0.101	-0.2399	-0.1346
	Z	-0.0632	-0.1618	0.0092	-0.0294	-0.2472	-0.1040	-0.1807	-0.0420	0.14308	0.0142	0.03684	0.0302
F	X	0.0652	-0.0640	0.0917	-0.1886	0.0665	0.1891	0.14822	0.00739	0.21744	-0.257	-0.0188	0.2086
	Y	-0.0605	0.0501	-0.0776	0.1648	-0.052	-0.1060	-0.1385	0.01799	-0.1543	-0.330	-0.0184	0.2732
	Z	-0.0988	0.1196	-0.0459	0.1406	-0.113	0.2356	-0.1976	0.22800	0.13027	0.0413	0.00754	-0.0485

F	X	0.0165	0.0226	0.0341	0.2035	0.1894	0.2206	-0.0612	-0.3404	-0.0748	-0.025	0.04304	-0.0254
	Y	0.1181	-0.0049	-0.068	-0.0943	0.3068	-0.1818	-0.2410	0.02387	0.21279	-0.000	-0.0105	0.0042
	Z	0.0056	-0.0087	-0.003	-0.0355	-0.012	-0.0399	0.00441	0.03880	0.00562	-0.227	0.32719	-0.1840
F	X	0.0670	0.11891	0.0049	0.1393	0.0259	-0.1099	0.16141	0.00093	0.11976	0.1184	0.29346	0.1551
	Y	-0.0748	-0.1179	-0.0020	-0.1706	0.0369	0.1527	-0.1765	0.03197	-0.1698	0.1013	0.23894	0.1244
	Z	0.0819	0.15921	-0.0069	0.0199	0.2778	0.1046	0.16213	0.23988	-0.1346	-0.017	-0.0332	-0.009
F	X	-0.0645	0.05903	-0.0830	0.1786	-0.0142	-0.1919	-0.1454	-0.0082	-0.2198	0.2578	0.01778	-0.2014
	Y	0.0742	-0.0667	0.0750	-0.1630	0.0386	0.1101	0.13834	-0.0183	0.15495	0.3307	0.01787	-0.2641
	Z	0.1140	-0.1298	0.0451	-0.1296	0.0805	-0.2316	0.20336	-0.1320	-0.039	-0.0098	0.0289	
F	X	0.0195	0.0131	0.0394	0.2353	0.1905	0.2101	-0.0581	-0.3398	0.05713	-0.026	0.04398	-0.0564
	Y	-0.1165	-0.0174	0.0725	0.0241	-0.3102	0.1796	0.2468	-0.0262	-0.1747	0.0012	0.00998	-0.0117
	Z	0.0055	-0.0106	-0.0037	-0.0248	-0.0132	-0.0338	0.0046	0.04152	0.00376	-0.235	0.35999	-0.3621
F	X	0.0686	0.1044	0.0106	0.1767	0.0271	-0.1112	0.16253	0.00022	0.14174	0.1279	0.27532	0.2864
	Y	0.0706	0.1067	0.0023	0.2013	-0.034	-0.1518	0.17415	-0.0337	0.20490	-0.107	-0.2278	-0.2258
	Z	0.0810	0.1548	-0.0119	0.1125	0.2789	0.09381	0.16949	0.23785	-0.2343	-0.017	-0.0341	-0.0496
F	X	-0.0675	0.0671	-0.0919	0.1621	-0.0152	-0.1969	-0.1439	-0.0095	-0.2134	0.2476	0.03546	-0.1234
	Y	-0.0752	0.0558	-0.0755	0.1456	-0.039	-0.1128	-0.1366	0.01774	-0.1410	-0.317	-0.0418	0.1602
	Z	0.1133	-0.1251	0.0437	-0.1556	0.0792	-0.2480	0.2046	-0.2253	-0.2616	-0.040	-0.0076	0.0313
K	X	-0.0030	0.0054	-0.0054	-0.0001	0.1235	0.0189	0.0022	0.00809	0.00218	0.0000	-0.0000	0
	Y	-0.0080	-0.0035	0.0003	-0.0003	-0.0172	-0.0059	0.0008	0.00063	0.00015	0.0001	0.00003	0.0002
	Z	0.0030	0.0002	-0.0003	-0.0007	-0.0012	-0.0035	-0.0001	0.00002	0.00002	0.0009	-0.0012	-0.0077
K	X	0.0009	-0.0020	0.0037	-0.0131	0.1142	-0.0079	0.0045	-0.00674	0.00243	0.0002	-0.0003	0
	Y	0.0054	-0.0020	-0.0004	-0.0011	0.0173	0.0045	-0.0001	0.00006	-0.0003	-0.000	0.00011	0.0004
	Z	0.0032	-0.0026	0.0007	0.0017	0.0001	0.0042	0.0002	0.00450	0.00085	-0.001	0.00222	0.0078
Sc	X	0.0014	-0.0073	0.0032	-0.0045	0.0571	0.0024	-0.0009	-0.0046	-0.0018	-0.001	0.00078	-0.0089
	Y	0.0072	-0.0097	-0.0004	-0.0016	0.0065	0.0007	0.0009	0.00004	-0.0001	-0.000	-0.0000	0.0017
	Z	0.0050	-0.0048	-0.0000	0.0067	0.0023	0.0017	0.0005	-0.0011	-0.0004	0.0013	-0.0023	0.0510
Sc	X	-0.0031	0.00984	-0.0044	-0.0029	0.0586	0.0021	-0.0014	-0.0056	-0.0025	0.0006	-0.0004	0.0079
	Y	-0.0101	-0.0018	0.0014	-0.0014	-0.0061	-0.0012	-0.0017	0.00010	0.00068	-0.000	-0.0006	0.0035
	Z	0.0050	-0.0010	0.0000	-0.0068	0.0042	-0.0017	0.0002	-0.0027	-0.0005	0.0073	-0.0105	-0.0679

B_g	Ω	cm^{-1}	29	43	62	66	67	99	152	160	187	271	302	346
Rb	X	-0.0092	-0.4325	-0.0101	-0.0048	0.09225	0.01888	-0.0247	-0.0233	-0.0096	-0.0016	0.00191	-0.0029	
	Y	-0.4081	0.00014	0.04389	0.08765	0.07812	-0.0454	-0.1669	0.01828	-0.0026	0.00244	0.00163	-0.0008	
	Z	-0.0301	-0.0480	0.00338	-0.4157	0.14023	-0.2155	-0.0051	-0.0845	-0.0068	-0.0001	0.04086	0.01705	
Rb	X	0.00588	0.39943	0.01354	-0.0045	-0.0368	-0.0452	0.02686	0.02138	0.00207	0.00208	-0.0018	0.000311	
	Y	-0.3131	0.01597	0.04575	0.08338	0.07585	-0.0264	-0.1660	0.02704	-0.0072	0.00264	0.00188	-0.0015	
	Z	-0.0293	0.06504	0.00078	0.41487	-0.1282	0.20024	0.00719	0.04569	0.01003	0.00010	-0.0396	-0.0172	
Rb	X	0.10475	-0.5291	-0.0078	0.00098	0.03912	0.03103	-0.0246	-0.0253	-0.0107	-0.0021	0.00195	-0.0021	
	Y	0.56022	0.04641	-0.0476	-0.0834	-0.0824	0.03693	0.16659	-0.0279	0.00260	-0.0024	-0.0018	0.00216	
	Z	-0.1054	0.05908	-0.0018	-0.4128	0.13008	-0.2169	-0.0071	-0.0466	-0.0067	-0.0000	0.04097	0.01698	
Rb	X	-0.0836	0.54820	-0.0011	0.01293	-0.1088	-0.0378	0.02737	0.02160	0.00334	0.00155	-0.0023	0.00208	
	Y	0.44834	0.06716	-0.0484	-0.0845	-0.0808	0.00474	0.16654	-0.0175	0.00742	-0.0027	-0.0020	0.00221	
	Z	0.04548	-0.0778	-0.0026	0.41624	-0.1407	0.20590	0.00542	0.08366	0.01019	0.00018	-0.0396	-0.0174	
F	X	-0.0167	-0.0855	-0.0829	0.07822	-0.0767	-0.3868	0.09266	0.29987	0.08606	0.00494	0.04085	0.03878	
	Y	0.10398	0.03248	-0.1680	0.08373	0.26587	0.02913	-0.3214	0.12782	-0.0076	-0.0084	0.00546	0.00926	
	Z	0.00111	0.00743	0.00350	0.00903	-0.0173	0.08630	-0.0019	-0.0054	-0.0118	-0.0043	0.42139	0.21824	
F	X	-0.0644	-0.0234	-0.1735	-0.0640	-0.0977	0.03840	-0.0252	0.02535	-0.1814	-0.2821	0.14640	-0.1860	
	Y	-0.0792	-0.0213	-0.2149	-0.0889	-0.0671	0.06954	0.00329	0.03975	-0.3020	0.20029	-0.1404	0.14241	
	Z	0.06359	-0.0209	0.02994	0.02143	-0.3007	-0.1508	-0.2631	-0.1757	-0.0017	0.03065	-0.0009	0.04282	
F	X	0.04893	0.02885	0.19775	0.09948	0.09588	-0.1273	0.02537	0.06059	-0.2905	0.21348	0.12117	-0.1990	
	Y	-0.0041	-0.0002	0.19445	0.04975	0.06606	-0.0793	0.00899	0.06333	-0.2266	-0.3058	-0.1312	0.26394	
	Z	-0.0203	-0.0060	-0.2334	-0.0967	0.10809	-0.1190	0.18164	-0.2439	-0.0380	-0.0356	0.00778	0.02907	
F	X	0.01986	0.10585	0.09713	-0.0967	0.14757	0.36991	-0.0885	-0.2860	-0.1282	-0.0087	-0.0363	-0.0600	
	Y	0.12477	0.03775	-0.1683	0.08844	0.25662	-0.0967	-0.3244	0.04473	-0.0017	-0.0101	0.00515	0.01394	
	Z	0.01729	-0.0096	-0.0041	-0.0074	0.00889	-0.0788	0.00227	0.00831	0.01335	-0.0287	-0.3993	-0.3679	
F	X	0.07007	0.03634	0.18104	0.05497	0.14340	-0.0610	0.02578	-0.0839	0.20571	0.26609	-0.1562	0.28889	
	Y	-0.0940	-0.0319	-0.2217	-0.0795	-0.1205	0.11969	0.00066	0.12519	-0.2467	0.18723	-0.1478	0.22452	
	Z	-0.0182	0.03938	-0.0226	-0.0292	0.32313	0.16866	0.27522	0.25798	0.00569	-0.0272	0.00449	-0.0567	
F	X	-0.0638	-0.0115	-0.1924	-0.1087	-0.0494	0.17797	-0.0362	0.03565	0.28501	-0.2051	-0.1187	0.12312	
	Y	0.02014	-0.0175	0.18879	0.05842	0.02614	-0.1230	0.00944	-0.0021	-0.1657	-0.2956	-0.1281	0.16557	
	Z	0.05615	-0.0152	0.22825	-0.1688	-0.1486	0.11556	-0.1896	0.32524	0.03417	0.03585	-0.0052	-0.0162	

F	X	0.00632	-0.0263	-0.0974	0.09609	-0.1450	-0.1957	0.09150	0.29603	0.08316	0.01020	0.04325	0.04775
	Y	-0.1944	-0.0877	0.17345	-0.0883	-0.2458	-0.0251	0.32495	-0.0434	0.00852	0.00778	-0.0056	-0.0106
	Z	0.01123	0.00336	0.00767	0.00623	0.00912	0.06629	-0.0012	-0.0009	-0.0103	0.02928	0.43510	0.28743
F	X	-0.0058	0.00420	-0.1810	-0.0533	-0.1385	0.00552	-0.0261	0.08484	-0.1805	-0.2663	0.15532	-0.2735
	Y	0.01023	0.00316	0.22336	0.07762	0.11622	-0.0128	-0.0015	-0.1254	0.30412	-0.1872	0.14756	-0.2128
	Z	0.08035	-0.0300	0.02425	0.02766	-0.3061	-0.1244	-0.2599	-0.2583	-0.0012	0.02787	0.00143	0.03207
F	X	0.04207	-0.0197	0.19445	0.10588	0.05284	-0.0978	0.03033	-0.0362	-0.2905	0.20502	0.11542	-0.1320
	Y	-0.0564	-0.0043	-0.1879	-0.0574	-0.0249	0.04202	-0.0101	0.00533	0.22468	0.29558	0.12443	-0.1765
	Z	-0.0249	0.02149	-0.2309	0.16929	0.12910	-0.2001	0.18456	-0.3264	-0.0379	-0.0354	0.00516	0.03937
F	X	-0.0019	0.01776	0.08813	-0.0807	0.08351	0.24127	-0.0920	-0.2970	-0.1328	-0.0054	-0.0383	-0.0300
	Y	-0.2179	-0.0876	0.17224	-0.0849	-0.2580	0.12274	0.32184	-0.1284	0.00177	0.00912	-0.0050	-0.0072
	Z	0.00745	-0.0012	-0.0065	-0.0091	-0.0006	-0.0712	0.00203	0.00773	0.01338	0.00465	-0.3979	-0.1663
F	X	0.00664	-0.0141	0.17698	0.06237	0.09855	-0.0424	0.02478	-0.0249	0.20578	0.28228	-0.1481	0.17140
	Y	0.02094	-0.0102	0.21779	0.08828	0.07032	-0.0878	-0.0052	-0.0424	0.24937	-0.2005	0.14145	-0.1323
	Z	-0.0414	0.01337	-0.0300	-0.0221	0.28208	0.18465	0.26891	0.17568	0.00638	-0.0309	-0.0002	-0.0198
F	X	-0.0617	0.00345	-0.2026	-0.0975	-0.0991	0.11369	-0.0343	-0.0616	0.28398	-0.2132	-0.1245	0.20695
	Y	-0.0843	-0.0186	-0.1941	-0.0494	-0.0688	0.06695	-0.0080	-0.0637	0.16297	0.30695	0.13657	-0.2750
	Z	0.06840	-0.0006	0.23845	-0.1812	-0.0935	0.14851	-0.2002	0.23941	0.03281	0.03522	-0.0006	-0.0533
K	X	-0.0058	0.03035	-0.0014	0.00147	0.00171	-0.1086	0.00454	-0.0039	0.00254	-0.0000	-0.0000	0.00017
	Y	-0.0103	-0.0105	0.00131	-0.0008	-0.0019	0.12956	-0.0008	0.00012	0.00206	-0.0001	-0.0000	-0.0002
	Z	0.01044	0.00495	0.00029	-0.0002	-0.0004	0.05858	0.00058	0.00013	0.00231	-0.0000	-0.0010	0.00888
K	X	-0.0010	-0.0249	0.00383	-0.0030	0.00482	0.11994	0.00336	-0.0041	0.00357	-0.0000	-0.0005	0.00005
	Y	-0.0217	-0.0108	0.00089	0.00063	0.00230	-0.1083	0.00120	-0.0002	-0.0021	0.00014	0.00023	-0.0004
	Z	0.00364	-0.0047	0.00064	-0.0003	-0.0006	-0.0440	-0.0015	-0.0038	0.00164	0.00012	0.00284	-0.0089
Sc	X	-0.0326	-0.0141	0.00135	-0.0010	0.00121	0.00064	-0.0025	0.00302	0.02376	-0.0001	0.00232	0.01073
	Y	-0.0174	-0.0147	0.00132	-0.0002	0.00252	-0.0018	-0.0013	0.00006	0.00097	-0.0004	0.00105	-0.0016
	Z	0.00721	0.00026	-0.0012	-0.0000	-0.0142	-0.0060	0.00066	0.00149	-0.0079	-0.0002	-0.0173	-0.0577
Sc	X	0.02777	0.01789	-0.0001	2.82525	0.00253	0.01100	-0.0034	0.00392	0.02653	0.00011	-0.0012	-0.0086
	Y	-0.0456	-0.0118	0.00154	-0.0002	0.00028	0.00494	0.00128	0.00017	-0.0010	0.00099	-0.0027	-0.0036
	Z	0.02242	0.00015	0.00265	-0.0011	0.01367	0.01183	-0.0001	0.00250	-0.0078	-0.0006	-0.0340	0.07946

A_ν	Ω, cm^{-1}	0	29	40	46	49	71	101	111	116
Rb	X	0.02585	-0.217	-0.0566	0.44635	0.22078	-0.0073	-0.0033	0.01371	-0.0268
	Y	0.34344	0.4179	0.11502	0.10832	0.11919	-0.0583	0.01634	0.01629	0.01273
	Z	0.00537	0.1714	-0.4425	-0.1105	0.12684	-0.0289	-0.0635	-0.0003	-0.0122
Rb	X	0.02656	0.1791	0.07562	-0.4613	-0.2184	-0.0057	-0.0033	-0.0123	0.02948
	Y	0.34084	0.3363	0.10589	0.11079	0.11895	-0.0605	0.02614	0.01598	0.01600
	Z	0.00385	-0.148	0.43161	0.11803	-0.1322	0.02975	0.05993	0.00217	0.01388
Rb	X	0.02720	0.1997	0.14186	-0.2480	-0.2278	0.00442	0.00442	-0.0120	0.02732
	Y	0.34010	0.1228	0.10761	0.09546	0.11778	-0.0522	0.03831	0.01801	0.01936
	Z	0.00120	-0.116	0.44151	0.11034	-0.1278	0.01754	-0.0528	0.00233	0.01047
Rb	X	0.02706	-0.171	-0.1539	0.24864	0.22700	0.00851	-0.0220	0.01336	-0.0272
	Y	0.33789	0.1975	0.09685	0.10286	0.12119	-0.0529	0.03156	0.01803	0.01835
	Z	0.00198	0.1668	-0.4302	-0.1223	0.13097	-0.0193	0.04542	-0.0012	-0.0137
F	X	0.01177	-0.046	0.07346	-0.1711	0.14726	0.01702	0.22104	-0.0922	0.00884
	Y	0.15944	-0.209	-0.0736	-0.1094	-0.0989	0.07733	-0.0176	-0.0161	0.01498
	Z	0.00102	-0.024	-0.0125	0.01986	-0.0388	-0.2198	-0.0049	-0.0916	0.00749
F	X	0.01178	-0.104	0.04407	-0.0969	0.18051	-0.0830	-0.0337	0.04443	0.04907
	Y	0.15973	-0.121	-0.0360	-0.0506	-0.0196	-0.0226	-0.0676	0.02746	0.03268
	Z	0.00036	-0.053	-0.0219	-0.0000	-0.0434	-0.2388	-0.0163	0.12547	0.31527
F	X	0.01295	0.0065	-0.1034	0.11752	-0.2070	0.02868	0.05003	0.02610	0.04813
	Y	0.15909	-0.121	-0.0685	-0.0104	-0.0704	0.01195	0.06798	0.00538	-0.0415
	Z	0.00183	0.0137	0.02154	-0.0332	0.08754	0.21512	-0.1556	0.02921	0.33991
F	X	0.01341	0.0419	-0.0809	0.18971	-0.1464	-0.0235	-0.2112	0.08899	-0.0173
	Y	0.15746	-0.229	-0.0767	-0.1068	-0.0973	0.08319	-0.0582	-0.0151	0.01736
	Z	0.00180	0.0134	0.01341	-0.0210	0.03894	0.22116	0.00649	0.09263	-0.0058
F	X	0.01297	0.1127	-0.0490	0.10523	-0.1801	0.07634	0.02921	-0.0436	-0.0428
	Y	0.15985	-0.128	-0.0327	-0.0567	-0.0783	0.01140	-0.0522	0.02783	0.02692
	Z	0.00199	0.0415	0.01335	0.01196	0.04339	0.23800	0.03800	-0.1251	-0.3071
F	X	0.01308	0.0088	0.09623	-0.1084	0.20697	-0.0366	-0.0395	-0.0270	-0.0463
	Y	0.15850	-0.139	-0.0599	-0.0201	-0.0723	0.01866	0.05686	0.00645	-0.0435
	Z	-0.0002	-0.046	-0.0108	0.02190	-0.0846	-0.2088	0.13765	-0.0251	-0.3395

F	X	0.01331	0.0476	-0.0622	0.18956	-0.1464	-0.0101	-0.3859	0.09817	-0.0170
	Y	0.16044	-0.148	-0.0622	-0.0806	-0.0967	0.09486	-0.0370	-0.0119	0.02571
	Z	0.00215	0.0152	0.01125	-0.0207	0.03879	0.22120	0.04958	0.09042	-0.0051
F	X	0.01437	0.1208	-0.0419	0.09818	-0.1809	0.09274	0.04832	-0.0438	-0.0446
	Y	0.15825	-0.142	-0.0400	-0.0500	-0.0172	-0.0312	0.09224	0.02799	0.02689
	Z	0.00208	0.0048	0.02791	0.00612	0.04410	0.25882	-0.0594	-0.1241	-0.3179
F	X	0.01099	-0.022	0.10184	-0.1162	0.20755	-0.0372	-0.1037	-0.0270	-0.0469
	Y	0.16025	-0.116	-0.0665	-0.0147	-0.0725	0.01742	0.09594	0.00636	-0.0430
	Z	0.00186	-0.017	-0.0217	0.02473	-0.0867	-0.2224	0.06469	-0.0249	-0.3412
F	X	0.01188	-0.051	0.06480	-0.1966	0.14585	0.01885	0.37049	-0.0933	0.00977
	Y	0.15895	-0.125	-0.0623	-0.0826	-0.0991	0.09921	0.00156	-0.0149	0.01381
	Z	0.00098	-0.025	-0.0121	0.02287	-0.0387	-0.2224	-0.0441	-0.0913	0.00709
F	X	0.01123	-0.132	0.04574	-0.1034	0.18038	-0.0861	-0.0498	0.04298	0.04796
	Y	0.15868	-0.157	-0.0344	-0.0576	-0.0202	-0.0232	-0.1019	0.02637	0.03110
	Z	0.00164	-0.042	-0.0200	-0.0150	-0.0439	-0.2568	0.06325	0.12380	0.31421
F	X	0.01320	0.0282	-0.0944	0.10784	-0.2073	0.04397	0.12549	0.02430	0.04829
	Y	0.15935	-0.107	-0.0603	-0.0225	-0.0702	0.02450	0.11228	0.00426	-0.0399
	Z	0.00256	0.0023	0.01170	-0.0101	0.08700	0.21511	-0.0656	0.02549	0.33356
K	X	0.01849	-0.006	-0.0784	0.17421	-0.0559	0.09563	0.42379	-0.1620	0.19660
	Y	0.22935	-0.070	-0.0432	-0.0322	-0.0315	0.00425	-0.0070	-0.0756	-0.0568
	Z	0.00231	0.0093	0.00410	0.02044	0.01247	0.02690	-0.2016	-0.6122	0.11386
K	X	0.01763	0.0092	0.07595	-0.1685	0.05564	-0.0974	-0.4095	0.15975	-0.1980
	Y	0.22948	-0.058	-0.0425	-0.0321	-0.0326	0.00421	-0.0804	-0.0697	-0.0354
	Z	0.00196	-0.016	-0.0042	-0.0196	-0.0122	-0.0252	0.20446	0.60446	-0.1125
Sc	X	0.01841	-0.117	0.06818	-0.0872	0.28067	-0.0639	0.02700	-0.0177	-0.0437
	Y	0.24550	-0.131	-0.0325	-0.0478	-0.0551	0.03694	-0.0067	-0.0036	-0.0100
	Z	0.00150	-0.039	-0.0187	0.01158	-0.0785	-0.3570	0.03740	-0.1537	0.01899
Sc	X	0.02028	0.1196	-0.0698	0.09086	-0.2805	0.06445	-0.0200	0.01744	0.04295
	Y	0.24532	-0.116	-0.0342	-0.0454	-0.0518	0.03756	-0.0054	-0.0034	-0.0112
	Z	0.00310	0.0214	0.01860	-0.0102	0.07888	0.35694	-0.0335	0.15397	-0.0184

A_u	Ω, cm^{-1}	119	126	134	184	196	221	316	321	342
Rb	X	-0.0388	-0.0056	0.08017	0.02205	-0.1009	-0.0119	-0.0202	0.03907	0.00424
	Y	-0.0343	0.07948	0.01873	-0.0731	-0.0077	-0.0069	-0.0085	0.00109	-0.0043
	Z	-0.0042	0.01198	-0.0094	0.00515	0.00076	-0.0012	0.00768	0.00220	0.00197
Rb	X	0.02880	0.00488	-0.0824	-0.0213	0.10106	0.01180	0.02119	-0.0387	-0.0041
	Y	-0.0350	0.07875	0.02294	-0.0720	-0.0085	-0.0066	-0.0163	-0.0037	-0.0041
	Z	0.00460	-0.0138	0.01023	-0.0069	-0.0027	0.00196	-0.0049	-0.0040	-0.0013
Rb	X	0.02730	0.00492	-0.0843	-0.0212	0.10167	0.01117	0.02112	-0.0386	-0.0045
	Y	-0.0334	0.07888	0.02347	-0.0719	-0.0085	-0.0065	-0.0163	-0.0037	-0.0035
	Z	0.00415	-0.0131	0.00659	-0.0068	-0.0028	0.00108	-0.0053	-0.0035	0.00120
Rb	X	-0.0392	-0.0053	0.08003	0.02202	-0.1010	-0.0120	-0.0202	0.03902	0.00487
	Y	-0.0339	0.07902	0.02052	-0.0729	-0.0080	-0.0067	-0.0086	0.00106	-0.0041
	Z	-0.0048	0.01187	-0.0116	0.00499	0.00035	-0.0005	0.00814	0.00170	-0.0008
F	X	0.04989	0.00197	0.15915	0.02107	-0.2182	0.01715	-0.0134	0.04322	-0.0430
	Y	-0.3356	0.08264	0.03898	-0.1780	-0.0318	0.00150	-0.0257	-0.0078	-0.0100
	Z	-0.0332	0.00367	-0.0088	0.01458	0.03560	0.3644	0.00423	0.07428	-0.2569
F	X	0.12596	0.05594	-0.1079	-0.2575	0.12028	-0.0328	0.06533	0.24391	0.06957
	Y	0.19518	0.09322	-0.2216	0.01858	-0.2284	0.01515	-0.0819	-0.1883	-0.0503
	Z	-0.0637	-0.0470	0.06659	0.06030	-0.0024	-0.2160	-0.0053	-0.0238	-0.0968
F	X	0.19340	0.07258	0.19560	-0.2334	-0.0250	0.04733	0.15653	-0.0629	-0.0765
	Y	0.13464	0.06302	0.13696	0.12250	0.25057	-0.0126	-0.2176	0.03796	0.09802
	Z	0.04518	-0.0264	0.07514	0.04236	0.00762	0.22016	-0.0274	-0.0048	0.10439
F	X	-0.0244	0.00118	-0.1695	-0.0177	0.21666	-0.0217	0.02446	-0.0499	0.03344
	Y	-0.3425	0.08337	0.03054	-0.1794	-0.0308	0.00106	-0.0199	-0.0029	-0.0084
	Z	0.02849	-0.0053	0.01153	-0.0072	-0.0203	-0.3292	0.08368	-0.1236	0.20195
F	X	-0.1405	-0.0565	0.10576	0.25699	-0.1203	0.03604	-0.0407	-0.2298	-0.0066
	Y	0.20934	0.09305	-0.2217	0.01636	-0.2269	0.01842	-0.0549	-0.1753	-0.0000
	Z	0.03498	0.04213	-0.0767	-0.0624	-0.0045	0.21903	0.00692	0.01740	0.08889
F	X	-0.1971	-0.0734	-0.1824	0.22859	0.02292	-0.0488	-0.1955	0.05395	0.02795
	Y	0.14585	0.08421	0.13400	0.11907	0.25549	-0.0114	-0.2737	0.02396	0.03508
	Z	-0.0085	0.02480	-0.0563	-0.0487	-0.0148	-0.2199	0.04276	0.00279	-0.0943

F	X	-0.0239	0.00122	-0.1719	-0.0173	0.21735	-0.0188	0.02413	-0.0502	0.05253
	Y	-0.3441	0.08286	0.03512	-0.1804	-0.0320	0.00149	-0.0202	-0.0031	-0.0126
	Z	0.02863	-0.0052	0.01299	-0.0066	-0.0251	-0.3390	0.07828	-0.1177	0.31521
F	X	-0.1420	-0.0569	0.10217	0.25771	-0.1220	0.03479	-0.0450	-0.2233	-0.1224
	Y	0.21287	0.09391	-0.2188	0.01680	-0.2243	0.01760	-0.0586	-0.1692	-0.0916
	Z	0.03122	0.04374	-0.0828	-0.0634	-0.0021	0.21342	0.00774	0.01677	0.10654
F	X	-0.1978	-0.0736	-0.1815	0.22921	0.02144	-0.0473	-0.1960	0.05485	0.03904
	Y	0.14689	0.08422	0.13303	0.11919	0.25402	-0.0099	-0.2736	0.02475	0.04940
	Z	-0.0094	0.02512	-0.0586	-0.0482	-0.0140	-0.2207	0.04245	0.00296	-0.0960
F	X	0.04942	0.00159	0.15948	0.02112	-0.2160	0.01657	-0.0133	0.04325	-0.0395
	Y	-0.3335	0.08335	0.03737	-0.1774	-0.0313	0.00140	-0.0259	-0.0077	-0.0097
	Z	-0.0334	0.00384	-0.0090	0.01429	0.03515	0.33307	0.00868	0.06913	-0.2249
F	X	0.12536	0.05595	-0.1096	-0.2564	0.12072	-0.0334	0.06636	0.24219	0.05500
	Y	0.19410	0.09313	-0.2239	0.01951	-0.2267	0.01505	-0.0833	-0.1870	-0.0383
	Z	-0.0637	-0.0469	0.06633	0.06094	-0.0041	-0.2141	-0.0054	-0.0239	-0.0964
F	X	0.19157	0.07138	0.19967	-0.2317	-0.0218	0.04858	0.16032	-0.0677	0.00808
	Y	0.13151	0.08212	0.14008	0.12288	0.25168	-0.0140	-0.2229	0.04399	-0.0128
	Z	0.04248	-0.0261	0.07406	0.04094	0.00746	0.22311	-0.0274	-0.0041	0.08825
K	X	-0.0487	-0.0484	-0.4025	-0.0345	0.15905	0.00811	0.01476	-0.0263	-0.0002
	Y	0.08734	-0.6379	0.02791	-0.1147	0.00045	-0.0031	-0.0058	-0.0028	0.00285
	Z	0.07121	0.09542	0.06548	-0.0088	0.02116	-0.2182	0.00829	0.00470	-0.0737
K	X	0.06973	0.04886	0.41196	0.03393	-0.1591	-0.0087	-0.0157	0.02647	0.00075
	Y	0.08326	-0.6389	0.03731	-0.1125	0.00026	-0.0028	-0.0092	-0.0053	0.00314
	Z	-0.0691	-0.0795	-0.0723	0.00634	-0.0230	0.22022	-0.0064	-0.0064	0.07432
Sc	X	-0.0303	0.00563	0.07264	-0.0256	0.29879	0.06635	0.20661	-0.4827	-0.0822
	Y	0.01102	0.04097	-0.0226	0.35657	0.03007	0.01313	0.54088	0.23312	0.02359
	Z	-0.0544	0.01365	0.03227	0.01030	-0.0661	0.15167	-0.0576	-0.0480	0.52344
Sc	X	0.03454	-0.0051	-0.0716	0.02395	-0.2969	-0.0626	-0.2036	0.48331	0.08291
	Y	0.00883	0.04043	-0.0271	0.35975	0.02941	0.01370	0.42487	0.17999	0.02654
	Z	0.05362	-0.0151	-0.0292	-0.0007	0.07715	-0.1592	-0.0876	0.12949	-0.5511

B_u	Ω, cm^{-1}	135	136	152	186	188	199	316	319	392
Rb	X	-0.0021	-0.0278	-0.1073	0.00980	0.02873	0.00742	-0.0070	0.00137	-0.0363
	Y	0.05582	-0.0730	-0.0130	0.01434	-0.0245	0.10576	-0.0191	0.03858	-0.0002
	Z	0.01544	-0.0469	-0.0033	-0.0722	-0.0067	-0.0092	-0.0064	-0.0069	-0.0002
Rb	X	-0.0010	-0.0237	-0.1070	0.00688	0.03164	0.00730	0.00312	0.00669	-0.0364
	Y	-0.0606	0.06775	0.00933	-0.0120	0.02406	-0.1063	0.01469	-0.0379	0.00027
	Z	0.01641	-0.0463	-0.0047	-0.0728	-0.0050	-0.0093	-0.0110	-0.0073	-0.0003
Rb	X	-0.0050	-0.0295	-0.0997	0.00903	0.03121	0.00759	0.00305	0.00664	-0.0361
	Y	-0.0574	0.07063	0.01278	-0.0122	0.02493	-0.1061	0.01450	-0.0380	0.00031
	Z	0.01089	-0.0526	-0.0016	-0.0720	-0.0067	-0.0091	-0.0084	-0.0062	-0.0002
Rb	X	-0.0029	-0.0294	-0.1022	0.01101	0.03021	0.00747	-0.0074	0.00121	-0.0364
	Y	0.06152	-0.0676	-0.0089	0.01419	-0.0237	0.10580	-0.0192	0.03848	-0.0002
	Z	0.01230	-0.0503	-0.0032	-0.0729	-0.0051	-0.0092	-0.0089	-0.0081	-0.0003
F	X	-0.1193	-0.2075	0.15113	0.08296	0.23274	0.04024	-0.0400	-0.0320	0.10253
	Y	-0.0746	0.10835	0.00134	0.01197	0.03210	-0.2212	0.00702	-0.0327	-0.0008
	Z	0.03079	0.06823	-0.0041	0.31356	-0.0538	0.00450	-0.2703	-0.1744	0.03246
F	X	0.13274	-0.0918	0.07366	-0.0470	-0.1303	-0.2472	-0.0445	0.10788	0.23634
	Y	0.22040	-0.0559	-0.0111	0.00516	0.22544	0.02108	0.04767	-0.1091	-0.1111
	Z	-0.2156	-0.1478	-0.0345	-0.1704	0.00098	0.07668	-0.0137	-0.0326	-0.0209
F	X	-0.0165	0.26891	0.14356	-0.0599	0.00033	0.20539	0.15560	-0.1062	0.17015
	Y	-0.0517	0.10879	0.00853	-0.0114	0.26840	-0.1238	-0.1873	0.16058	-0.1014
	Z	0.19492	0.16476	0.04656	-0.1860	0.04413	-0.0538	-0.0436	0.01184	-0.0129
F	X	-0.1130	-0.1939	0.15105	0.07593	0.20957	0.03913	-0.0296	-0.0244	0.10103
	Y	0.07470	-0.1073	-0.0090	-0.0063	-0.0305	0.21756	-0.0147	0.03400	0.00081
	Z	0.02948	0.06656	-0.0030	0.31083	-0.0543	0.00366	-0.2668	-0.1649	0.03115
F	X	0.13568	-0.0916	0.07514	-0.0438	-0.0928	-0.2439	-0.0659	0.13677	0.23710
	Y	-0.2190	0.06506	0.00913	-0.0065	-0.2851	-0.0209	-0.0760	0.13183	0.11177
	Z	-0.2113	-0.1316	-0.0363	-0.1734	0.00392	0.07434	-0.0048	-0.0296	-0.0207
F	X	-0.0074	0.28739	0.14238	-0.0596	0.05836	0.20622	0.05566	-0.1147	0.17050
	Y	0.04467	-0.1203	-0.0075	-0.0060	-0.3077	0.12419	0.08368	-0.1630	0.10192
	Z	0.18980	0.17061	0.03702	-0.1893	0.04973	-0.0567	-0.0372	0.00632	-0.0132

F	X	-0.1111	-0.1907	0.14017	0.07268	0.23533	0.03975	-0.0270	-0.0236	0.10267
	Y	0.08742	-0.0948	-0.0006	-0.0065	-0.0311	0.21838	-0.0154	0.03468	0.00088
	Z	0.03029	0.06764	-0.0033	0.31309	-0.0586	0.00374	-0.2368	-0.1523	0.03375
F	X	0.13151	-0.0973	0.07645	-0.0491	-0.1333	-0.2453	-0.0376	0.15331	0.23591
	Y	-0.2176	0.07006	0.00818	0.00226	-0.2272	-0.0205	-0.0516	0.14543	0.11074
	Z	-0.2284	-0.1531	-0.0283	-0.1628	0.00435	0.07545	-0.0084	-0.0324	-0.0206
F	X	-0.0050	0.29064	0.14074	-0.0679	-0.0020	0.20586	0.06205	-0.1120	0.17047
	Y	0.04242	-0.1231	-0.0062	-0.0003	-0.2673	0.12425	0.08985	-0.1604	0.10181
	Z	0.18725	0.16585	0.03955	-0.1894	0.04118	-0.0558	-0.0367	0.00641	-0.01130
F	X	-0.1186	-0.2080	0.14564	0.08010	0.20981	0.04054	-0.0423	-0.0333	0.10241
	Y	-0.0741	0.10630	0.00897	0.01213	0.03252	-0.2186	0.00706	-0.0334	-0.0009
	Z	0.03056	0.06802	-0.0030	0.31436	-0.0515	0.00453	-0.2968	-0.1874	0.03211
F	X	0.13041	-0.0940	0.07695	-0.0412	-0.0902	-0.2459	-0.0519	0.10483	0.23627
	Y	0.21801	-0.0580	-0.0082	0.01385	0.28339	0.02175	0.05511	-0.1063	-0.1111
	Z	-0.2183	-0.1515	-0.0271	-0.1720	0.00230	0.07696	-0.0136	-0.0326	-0.0210
F	X	-0.0120	0.27261	0.13866	-0.0525	0.06092	0.20389	0.11465	-0.1190	0.17106
	Y	-0.0486	0.11108	0.00608	-0.0054	0.30878	-0.1227	-0.1625	0.17718	-0.1026
	Z	0.18809	0.15825	0.02866	-0.1918	0.05197	-0.0530	-0.0407	0.01335	-0.0130
K	X	-0.0044	0.10380	-0.5295	-0.0041	-0.0321	0.01419	0.00769	0.00347	-0.0622
	Y	0.38053	-0.2237	-0.0274	-0.0019	-0.0207	0.17134	-0.0083	0.02022	-0.0008
	Z	-0.0515	-0.0300	-0.0050	-0.1064	-0.0076	-0.0006	-0.0087	-0.0114	0.00074
K	X	-0.0088	0.08339	-0.5310	0.00190	-0.0341	0.01448	-0.0003	-0.0004	-0.0622
	Y	-0.3834	0.21715	0.02759	0.00470	0.02145	-0.1719	0.00614	-0.0190	0.00084
	Z	-0.0512	-0.0258	-0.0051	-0.1049	-0.0039	0.00037	-0.0053	-0.0064	0.00082
Sc	X	0.00464	0.00509	0.30932	0.00747	-0.2325	-0.0335	0.04704	0.04176	-0.5035
	Y	0.00116	0.07690	0.02358	-0.0018	-0.0147	0.30655	-0.1924	0.43049	0.01096
	Z	0.00693	0.04766	0.01114	0.35982	0.02912	-0.0069	0.46396	0.29550	0.00228
Sc	X	0.00653	0.01004	0.30830	0.01489	-0.2364	-0.0331	-0.0610	-0.0256	-0.5037
	Y	0.00011	-0.0740	-0.0234	-0.0083	0.01216	-0.3040	0.34829	-0.4841	-0.0109
	Z	0.00733	0.05026	0.00911	0.35699	0.02716	-0.0074	0.42250	0.26049	0.00163

Научное издание

Крылова Светлана Николаевна
Втюрин Александр Николаевич
Белю Ален
Крылов Александр Сергеевич
Замкова Наталья Геннадьевна

**ДИНАМИКА РЕШЕТКИ
И СПЕКТР
КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ
В ЭЛЬПАСОЛИТЕ Rb_2KScF_6 –
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ**

Отв. за выпуск А. Н. Втюрин
Редактор Н. И. Попова

ПлД № 48-39 от 25.03.96

Сдано в набор 24.06.03. Подписано в печать 10.06.03.

Формат 60×90/16. Гарнитура Ариал.

Объем 2.3 усл. печ. л. Заказ № 46. Тираж 70 экз.

Отпечатано в типографии Института физики СО РАН.
660036, Красноярск, Академгородок.