

УДК 548.3
 PACS 61.66.Fn
 DOI 10.24144/2415-8038.2020.48.23-29

І.І. Небола, А.Ф. Катаниця, Ю.О. Пал, А.Я. Штейфан, В.І. Сідей,
 І.П. Студеняк

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54 Україна,
 e-mail: ivan.nebola@uzhnu.edu.ua

ТЕОРЕТИЧНІ РОЗРАХУНКИ ФОНОННИХ СПЕКТРІВ КРИСТАЛІВ $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ І $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$

Проведено модельні розрахунки дисперсії фононів суперіоніків $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$. Опис моделей всіх структур зводився до побудови сукупностей векторів модуляції, визначення масових модуляційних функцій, формування узагальненої динамічної матриці як суперпозиції динамічних матриць одноатомних структур, а власні значення дисперсійних залежностей одночастинкових збуджень отримані на високосиметричних напрямках зони Бріллюена. Динамічні матриці протокристалу $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$ розраховувалися із врахуванням певної кількості силових постійних впливових координаційних груп.

Ключові слова: фононні спектри, суперіоніки, надгратка, протокристал, модуляційні вектори.

Вступ

Дослідження кристалічних структур аргіродитів зі значною іонною провідністю викликають велике зацікавлення з боку як експериментаторів, так і теоретиків. Фізико-хімічні властивості суперіонних кристалічних провідників $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, власне, і визначає їхня кристалічна структура, для якої характерним є часткове заповнення позицій певних кристалічних орбіт атомами $\text{Cu}(\text{Ag})$.

Теорія кольорової симетрії [1] та концепція надпросторової симетрії [2] дозволяють послідовно включити в симетрійний опис кристалічної структури додаткові “фізичні” параметри (колір, фазу, знак заряду, спіні тощо). Серед різновидів узагальненої симетрії остання є зручною і наглядною при побудові $(3 + d)$ -мірних моделей опису складних кристалічних утворень, об’єднаних єдиною метрикою і масштабом функції носія протокристалу [3]. Формування $(3 + d)$ -мірної метрики базується на його вищій симетрії і пов’язане з додатковим внутрішнім “фазовим” d -мірним простором, що дозволяє проводити опис складних кри-

сталів та систем як природних $(sa \times sa \times sa)$ -надграток. При цьому можуть бути враховані різні комбінації базисів протокристалу і реального кристалічного утворення разом зі всіма можливими варіантами композиційного заповнення кристалічних позицій. Використання повної сукупності векторів модуляції дозволяє визначити амплітуди масових модуляційних функцій і на їх основі згенерувати узагальнену динамічну матрицю реального фізичного об’єкту та матрицю масового збудження. Перша задається у вигляді суперпозиції динамічних матриць протокристалу, визначених у різних точках зони Бріллюена (ЗБ), пов’язаних векторами модуляції. Друга – описується амплітудами масових модуляційних функцій.

Метою даної роботи є використання концепції надпросторової симетрії для розрахунку фононних спектрів кристалів $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$.

Методика розрахунку

В концепції надпросторової симетрії [4, 5] дисперсійні криві фононного спектру кристалічного утворення визначаються як

розв’язки матричного рівняння при умові рівності нулеві визначника виду:

$$|D_{\alpha\beta}(k+q_i) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} - \omega^2 \rho_{(i-j)} \delta_{\alpha\beta}| = 0, \quad (1)$$

де $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$ – динамічні матриці одноатомного протокристалу, визначені у точках ЗБ $(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$, $\rho_{(i-j)} = \rho_i(q_i, \Delta^* b_{ij}^*)$ – амплітуди масової модуляційної функції, задані для векторів модуляції $(q_i - q_j)$, (\mathbf{k}) – хвильовий вектор, $\alpha, \beta - x, y, z$, $q_i -$ вектори модуляції. Розв’язок матричного рівняння відносно ω^2 дозволяє визначити дисперсійні залежності фононного спектру, а врахування різних варіантів композиційного заповнення – відслідковувати за їх генезисом [5].

Динамічні матриці протокристалу $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$ визначаються за допомогою спів-

відношення:

$$D_{\alpha\beta}(k + q_i) = \sum_{(n \neq 0)} \alpha_n \frac{n_\alpha n_\beta}{n^2} (1 - e^{i(k+q_i)n}), \quad (2)$$

де α_n - силова постійна між атомом у 0-ій позиції і n -им сусіднім атомом, n_α, n_β - проєкції вектора \vec{n} на осі α, β .

У еквідистантному наближенні для моделі силова характеристика залежить тільки від відстані між атомами і, тоді, взаємодія різносортних атомів, які знаходяться у рівновіддалених позиціях, однакова. Це дозволяє формувати динамічну матрицю у квазидіагональному вигляді. У нееквідистантному наближенні α_n визначається як відстанню між позиціями, так і різницею фізичних характеристик об’єктів, що їх займають.

Табл. 1: Координати атомів та заселеність позицій у структурі $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$

Атом	Координати згідно [6]	Заселеність згідно [6]	Координати згідно [7]	Заселеність згідно [7]	Координати згідно нашої роботи	Заселеність згідно нашої роботи
Cu1(Ag1)	(0.02362, 0.25, 0.25)	0.624	(0.01747, 0.25, 0.25)	1.0	(0, 1/4, 1/4)	5/6
Cu2(Ag2)	((0.01914, 0.30918, 0.30918)	0.376	-	0.0	(0, 5/16, 5/16)	2/12
I	(0, 0, 0)	0.989	(0, 0, 0)	1.0	(0, 0, 0)	1.0
S1	(0.25, 0.25, 0.25)	0.989	(0.25, 0.25, 0.25)	1.0	(1/4, 1/4, 1/4)	1.0
S2	(0.62183, 0.62183, 0.62183)	1.0	(0.62183, 0.62183, 0.62183)	1.0	(5/8, 5/8, 5/8)	1.0
Si	(0.5, 0.5, 0.5)	1.0	(0.5, 0.5, 0.5)	1.0	(1/2, 1/2, 1/2)	1.0

Значення амплітуд масових характеристик $\rho(q_j)$ отримуються при розв’язанні системи рівнянь відносно амплітуд масових модуляційних функцій $\rho(q_j) = \rho_j$:

$$M(r_k) = \sum_{(j=1)}^s \rho(q) e^{iq_j r_k}, \quad (3)$$

де s – кількість можливих позицій атомів у надгратці, $M(r_k)$ – масові характеристики в цих

позиціях, q_j – масив векторів модуляції, кількість яких співпадає з кількістю позицій у надгратці.

Проведемо опис деяких представників родини аргіродиту в концепції надпросторової симетрії, виходячи з моделі природної ГЦК $(8a, 8a, 0)$; $(8a, 0, 8a)$; $(0, 8a, 8a)$ – надгратки, при розгляді силового поля в еквідистантному наближенні.

Табл. 2: Сукупності позицій, об'єднаних в орбіти, та модуляційних векторів–у зірки структур $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ з $((8a, 8a, 0); (8a, 0, 8a); (0, 8a, 8a))$ -надграткою сімейства аргіродиту для врахування часткової заселеності позиції $\text{Cu}_2(\text{Ag}_2)$

Атоми	Номер орбіти (позиції)	Позиції атомів, об'єднані в орбіти	Номер зірки (розмірність)	Вектори модуляції, об'єднані в зірки	
I	1(1)	[0,0,0]	1(1)	[0,0,0]	
	2(2-13)	[a,a,0]	2(12)	$[\pi/8a, \pi/8a, 0]$	
	3(14-19)	[2a,0,0]	3(6)	$[\pi/4a, 0, 0]$	
	4(20-43)	[2a,a,a]	4(24)	$[\pi/4a, \pi/8a, \pi/8a]$	
	5(44-55)	[2a,2a,0]	5(12)	$[\pi/4a, \pi/4a, 0]$	
	6(56-79)	[3a,a,0]	6(24)	$[3\pi/8a, \pi/8a, 0]$	
	7(80-87)	[2a,2a,2a]	7(8)	$[\pi/4a, \pi/4a, \pi/4a]$	
	8(88-135)	[3a,2a,a]	8(48)	$[3\pi/8a, \pi/4a, \pi/8a]$	
	9(136-141)	[4a,0,0]	9(6)	$[\pi/2a, 0, 0]$	
	Cu ₂ (Ag ₂)	10(142-153)	[3a,3a,0]	10(12)	$[3\pi/8a, 3\pi/8a, 0]$
		11(154-177)	[4a,a,a]	11(24)	$[\pi/2a, \pi/8a, \pi/8a]$
		12(178-201)	[4a,2a,0]	12(24)	$[\pi/2a, \pi/4a, 0]$
		13(202-225)	[3a,3a,2a]	13(24)	$[3\pi/8a, 3\pi/8a, \pi/4a]$
		14(226-249)	[4a,2a,2a]	14(24)	$[\pi/2a, \pi/4a, \pi/4a]$
		15(250-297)	[4a,3a,a]	15(48)	$[\pi/2a, 3\pi/8a, \pi/8a]$
		16(298-321)	[5a,a,0]	16(24)	$[5\pi/8a, \pi/8a, 0]$
		17(322-369)	[5a,2a,0]	17(48)	$[5\pi/8a, \pi/4a, \pi/8a]$
Cu ₁ (Ag ₁)		18(370-375)	[4a,4a,0]	18(6)	$[\pi/2a, \pi/2a, 0]$
		19(376-399)	[4a,3a,3a]	19(24)	$[\pi/2a, 3\pi/8a, 3\pi/8a]$
	20(400-411)	[5a,3a,0]	20(12)	$[3\pi/8a, 3\pi/8a, 0]$	
	21(412-423)	[4a,4a,2a]	21(12)	$[\pi/2a, \pi/2a, \pi/4a]$	
	22(424-429)	[6a,0,0]	22(6)	$[3\pi/4a, 0, 0]$	
	23(430-453)	[5a,3a,2a]	23(24)	$[3\pi/8a, 3\pi/8a, \pi/4a]$	
	24(454-477)	[6a,a,a]	24(24)	$[3\pi/4a, \pi/8a, \pi/8a]$	
	25(478-489)	[6a,2a,0]	25(12)	$[3\pi/4a, \pi/4a, 0]$	
S1	26(490-497)	[6a,2a,2a]	26(8)	$[3\pi/4a, \pi/4a, \pi/4a]$	
S2	27(498)	[4a,4a,4a]	27(1)	$[\pi/2a, \pi/2a, \pi/2a]$	
	28(499)	[-4a,-4a,-4a]	28(1)	$[\bar{\pi}/2a, \bar{\pi}/2a, \bar{\pi}/2a]$	
Si	29(500-511)	[7a,a,0]	29(12)	$[\bar{\pi}/8a, \pi/8a, 0]$	
	30(512)	[8a,0,0]	30(1)	$[\pi/a, 0, 0]$	

*В орбіті 18 не занята позиція [372], а в орбіті 10 позиції [142] і [153] заняті атомами Ag(Cu). Тобто розрахунок проведений в схемі (5+2).

Нагадаємо, що кристалічна структура суперіонних провідників $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ [6] утворюється аніонним каркасом та характерним заповненням атомами Cu(Ag) позицій катіонного каркасу. На зображеннях Патерсона піки задають заселеність наступних положень: 24-кратно виродженої позиції (g), 48-кратно виродженої позиції (h), 16-кратно виродженої позиції (e) та двох із чотирьох 4-кратно виродженої позиції (a), (b), (c), (d). Відповідно до цього

було вибрано наступні розміщення атомів: Cu₁(Ag₁) у 24(g), Cu₂(Ag₂) у 48(h), 16 із 20 Se у 16(e) із $x=3/8$, а 4 Se у 4(c), I у 4(a), атоми Ge у 4(b) [5].

Результати та їх обговорення

Для розрахунку фононного спектру кристалів $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ була вибрана модель структур з координатами атомів і їх за-

селеністю, наведеними в табл. 1.

Спроба врахування часткової заселеності позиції Cu2(Ag2) вимагає переходу до моделі з врахуванням 512-кратної мультиплікації елементарних комірок протокристалу з ГЦК базисом $(a, a, 0)$; $(a, 0, a)$; $(0, a, a)$ і надгратки з ГЦК базисом $(8a, 8a, 0)$; $(8a, 0, 8a)$; $(0, 8a, 8a)$, а саме $8*8*8=512$ мультиплікацією.

Сукупність 512-ти можливих позицій атомів охоплює 30 орбіт, а множина 512-ти векторів модуляції розбивається на 30 зірок (табл. 2).

Розгляд структури і розрахунки для надпросторової моделі були проведені шляхом розв'язку секулярного рівняння типу (1) порядку 1536×1536 із залученням 512 потенційних позицій з яких 14 зайняті атомами

структур Cu₇GeSe₅I і Ag₇GeSe₅I, а саме: I [1] (0, 0, 0), Cu2 (Ag2) [142] (3, 3, 0), Cu2 (Ag2) [153] (0, -3, -3), Cu1 (Ag1) [370] (4,4,0), Cu1 (Ag1) [371] (4,0,4), Cu1 (Ag1) [373] (-4,4,0), Cu1 (Ag1) [374] (-4,0,4), Cu1 (Ag1) [375] (0,-4,4), Se2 [490] (6,2,2), Se2[491] (2,6,2), Se2 [492] (2,2,6), Se2 [493] (-6,2,2), Ge [498] (4,4,4), Si [512] (8,0,0).

Динамічні матриці протокристалу враховувалися в 512 точках зони Бріллюена. Модифікуючи заселеність кристалграфічних позицій атомами і корегуючи значення силових постійних в еквідистантному наближенні, з використання методики [8], були отримані фононні спектри для високосиметричних напрямків зони Бріллюена ГЦК гратки.

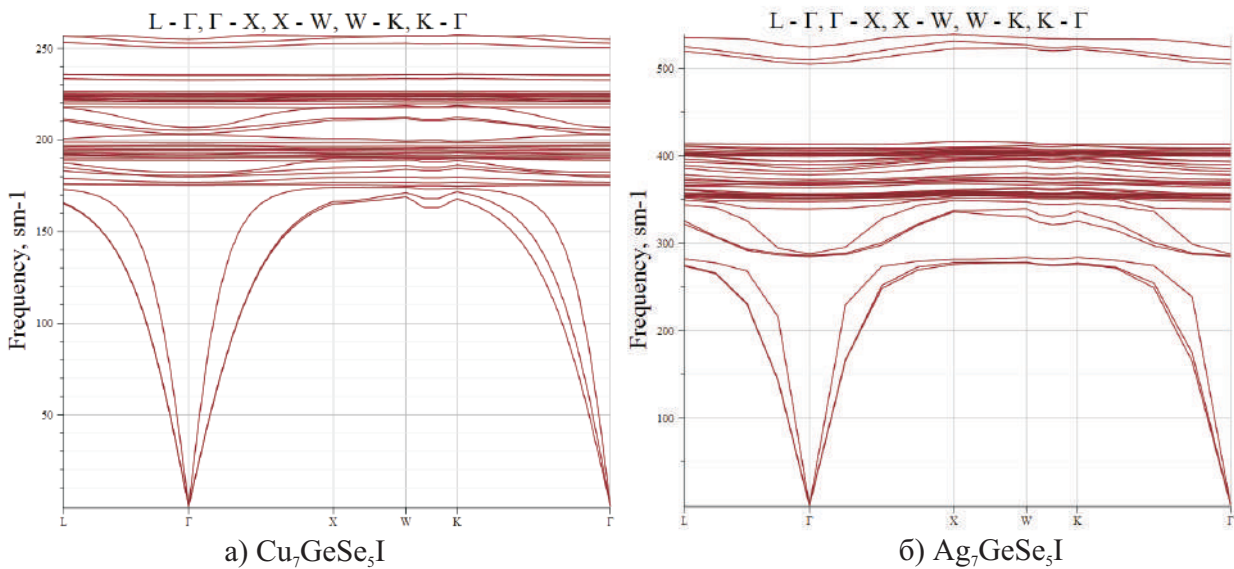


Рис. 1: Дисперсійні залежності фононів кристалів Cu₇GeSe₅I (а) і Ag₇GeSe₅I (б) для напрямків L–Γ, Γ–X, X–W, W–K, K–Γ.

Значення силових констант α_n наведені в порядку зростання віддалей між позицією орбіти $1(0,0,0)$ і $n + 1$, при цьому враховувалися всі можливі варіанти віддалей між парами атомів. Силкові постійні вибиралися в еквідистантному наближенні, взаємодія визначалася тільки віддалю і не залежала від сорту взаємодіючих пар атомів. Наприклад, для сполуки Ag₇GeSe₅I α_{26} –силова постійна, що описує взаємодію на віддалі $4a\sqrt{3}$ рівна $3N/m$, а інші відповідно: powerConstants:= Vector[row] (28, [15.1, 0, 0, 0, 0, 0.10e-1, 4,

0.10e-1, .6, 1, 0, 0, 0, 0, .7, 0, 3, 7, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0.8e-1, 3, 0, 8.5 (N/m)]. Аналогічно для структури Cu₇GeSe₅I: powerConstants:= [82.1, 0, 0, 0, 0, 3.1, 2.2, 1.7, 0.6, 1, 0, 0, 0, 0, 0.7, 0, 1, 5, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 10.0, 53, 0.6, 19 (N/m)]. Дисперсійні залежності фононів для напрямків L–Γ, Γ–X, X–W, W–K, K–Γ наведені на рис. 1.

Висновки

У результаті проведеного модельного аналізу структур Cu₇GeSe₅I і Ag₇GeSe₅I з враху-

ванням заселеності орбіти атомів $\text{Cu}_2(\text{Ag}_2)$ в метриці протокристалу ГЦК із $(a, a, 0)$; $(a, 0, a)$; $(0, a, a)$ – надграткою та ГЦК реальної структури із $((8a, 8a, 0)$; $(8a, 0, 8a)$; $(0, 8a, 8a)$)-надграткою, спостерігалася перебудова фононного спектру кристалів $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, що викликана зміною відповідних масових характеристик атомів Cu і Ag та певною кореляцією силових постійних. Проведені розрахунки свідчать

про задовільне співпадіння розрахункового діапазону частот з експериментальними значеннями в точці Γ ($150 - 350\text{с}^{-1}$) [9]. Отримані широкі частотні інтервали значень можуть відображати ефективну можливість їх зміни при зміні заселеності атомами $\text{Cu}(\text{Ag})$, що супроводжується високою іонною провідністю в суперіонній фазі кристалів $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ (“перестрибування” атомів між розглядуваними орбітами).

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Копцик В.А. Теоретико-групповые методы в физике реальных кристаллов и теории фазовых переходов / В.А. Копцик // Теоретико-групповые методы в физике.: Труды междунар. семинара. – М.: Наука. – 1980. – С. 368-381.
- [2] Janssen T. On the lattice dynamics of incommensurate crystal phases / T. Janssen // J.Phys.C: Solid State Phys. – 1979. – V.12, No.24. – P. 5381-5392.
- [3] Небола И.И. Генезис структуры и колебательных спектров кристаллов с $(sa \times sa \times sa)$ сверхрешеткой / И.И. Небола, А.Ф. Иваняс, В.Я. Киндрат // Физ. тверд. тела. – 1993. – Т.35, № 7. – С. 1852-1866.
- [4] Nebola I.I. 3+D Dimensional bases for the complex crystals lattice dynamics modeling / I.I. Nebola, I.M. Shkirta, A.F. Katanytsia, A.K.V. Dolynai // The 19th Small triangle meeting on theoretical physics. – Medzilaborce, 2017.– p. 141-148.
- [5] Nebola I.I. Model research of phonon spectra of argyrodites family / I.I. Nebola, A.Ja. Shteyfan, V.I. Sidey, A.F. Katanytsia, I.P. Studenyak, I.M. Shkyrta // Semiconductor Physics, Quantum Electronics Optoelectronics. – 2018. – v. 21, № 2. – p. 134-138.
- [6] Nilges T. A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure – property relations of high temperature ion conductors / T. Nilges, A.A. Pfitzner // Z. Kristallogr. – 2005. – V. 220. – P. 281-294.
- [7] Haznar A. X-ray study of the superionic phase transition in $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ // A. Haznar. A. Pietraszko, I.P. Studenyak // Solid State Ionics. – 1999. – V.119. – P. 31-36.
- [8] <https://maple.cloud/app/5753562177994752/Modeling+of+dispersions+of+phonon+spectr>.
- [9] Studenyak I.P. Phonon spectra of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ superionic ferroelastic: experimental and theoretical studies / I.P. Studenyak, K.Z. Rushchanskii, R.Yu. Buchuk, V.O. Stephanovich // Condensed Matter Physics. – 2007. – V.10. – P. 11-16.

Стаття надійшла до редакції 11.12.2020

И.И. Небола, А.Ф. Катаница, Ю.О. Пал, А.Я. Штейфан, В.И. Сидей,
И.П. Студеняк

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54 Украина

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ И $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$

Проведены модельные расчеты дисперсии фононов супериоников $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ и $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$. Описание моделей всех структур сводилось к построению совокупностей векторов модуляции, определению массовых модуляционных функций, формированию обобщенной динамической матрицы, как суперпозиции динамических матриц одноатомных структур, а собственные значения дисперсионных зависимостей одноэлементных возмущений получены на высокосимметричных направлениях зоны Бриллюэна. Динамические матрицы протокристалла $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$ рассчитывались с учетом определенного количества силовых констант влиятельных координационных групп.

Ключевые слова: фононные спектры, суперионики, сверхрешетка, протокристалл, модуляционные векторы.

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

Uzhgorod National University, 54, Voloshina str., 88000, Uzhgorod, Ukraine,
e-mail: ivan.nebola@uzhnu.edu.ua

THEORETICAL CALCULATIONS OF PHONON SPECTRA FOR $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ AND $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ CRYSTALS

The model calculations of the dispersions of the phonons for the superionic $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ AND $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ crystals was done. The description of the models of all the structures was reduced to the construction of the proper sets of modulation vectors, the definition of the mass modulation function, the construction of the generalized dynamic matrix taken as the superposition of the dynamic matrixes of single-atom structures; the eigenvalues of the dispersion dependences of the single-particle perturbations were obtained for the high-symmetry directions of the Brillouin zone. The dynamic matrices $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$ of the protocystal were calculated taking into account a certain number of force constants of the influential coordination groups.

Keywords: phonon spectra, superionics, superlattice, protocystal, modulation vectors.

REFERENCES

- [1] V.A. Koptsik, Teoretiko-grupповые методы в физике реальных кристаллов и теории фазовых переходов (Group theoretical methods in the physics of real crystals and in the phase transitions theory). In: "Teoretiko-grupповые metody v fizike: Trudy mezhdunarodnogo seminar", (Nauka, Moscow) – pp.368-381 (1980) (in Russian)
- [2] T. Janssen, On the lattice dynamics of incommensurate crystal phases, Journal of Physics C: Solid State Physics, vol.12, pp.5381-5392 (1979).

- [3] I.I. Nebola , A.F. Ivanyas, V.Ya. Kindrat, The genesis of the $(sa \times sa \times sa)$ structure and vibrational spectra of crystals with the $(Sa \times Sa \times Sa)$ superlattice. Solid State Physics, vol.35, pp.1852-1866 (1993) (in Russian).
- [4] I.I. Nebola, I.M. Shkirta, A.F. Katanytsia, A.-K.V. Dolynai, 3+D Dimensional bases for the complex crystals lattice dynamics modeling. In: "The 19th Small triangle meeting on theoretical physics. Mezdilaborce, Slovakia. October 15–18, 2017", pp.141-148 (2017).
- [5] I.I. Nebola, A.Ya. Shteyfan, V.I. Sidey, A.F. Katanytsia, I.P. Studenyak, I.M. Shkyrta, Model research of phonon spectra of argyrodites family. Semiconductor Physics, Quantum Electronics Optoelectronics, vol.21, pp.134-138 (2018).
- [6] T. Nilges, A.A. Pfitzner, Structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure – property relations of high temperature ion conductors, Zeitschrift für Kristallographie, vol.220, pp.281-294 (2005).
- [7] A. Haznar, A. Pietraszko, I.P. Studenyak, X-ray study of the superionic phase transition in Cu_6PS_5Br // A. Haznar. A. Pietraszko, I.P. Studenyak // Solid State Ionics. – 1999. – V.119. – P. 31-36.
- [8] <https://maple.cloud/app/5753562177994752/Modeling+of+dispersions+of+phonon+spectr>.
- [9] I.P. Studenyak, K.Z. Rushchanskii, R.Yu. Buchuk, V.O. Stephanovich, Phonon spectra of Cu_6PS_5Br superionic ferroelastic: experimental and theoretical studies, Condensed Matter Physics vol.10, pp.11-16.