

УДК 537.226; 538.936; 621.315
PACS number(s): 63.70; 78.30.F

ФОНОННІ СПЕКТРИ КРИСТАЛА Cs₂CdI₄ В ДАЛЕКІЙ ІНФРАЧЕРВОНІЙ ДІЛЯНЦІ

Т. Кулай

Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра радіофізики
вул. ген. Тарнавського, 107, 79017 Львів, Україна,
e-mail: kulay@rd.wups.lviv.ua

Виконано теоретико-груповий аналіз *A* і *B* модифікацій Cs₂CdI₄, з використанням методу позиційної симетрії. Отримано спектр *B*-Cs₂CdI₄ у далекій інфрачервоній ділянці. Методом дисперсійного аналізу визначено параметри коливних осциляторів кристала *B*-Cs₂CdI₄ в далекій ІЧ ділянці. З експериментальних результатів оцінено ефективну силову сталу взаємодії Cs⁺-CdI₄²⁻, а також ефективні заряди іонів у кристалі *B*-Cs₂CdI₄.

Ключові слова: теоретико-груповий аналіз, позиційна симетрія, осцилятор, дисперсійний аналіз.

Кристали Cs₂CdI₄ належать до класу сполук, структура, і, відповідно, фізичні властивості яких залежать від способу отримання [1–3]. Вирощені з розплаву, ці кристали належать до орторомбічної сингонії і мають просторову групу симетрії $D_{2h}^{16} = P_{nma}$ (тип кристалічної структури β -K₂SO₄, модифікація *A*) [1, 2]. Параметри ґратки, відповідно, такі: $a = 14,852 \text{ \AA}$, $b = 8,458 \text{ \AA}$, $c = 10,740 \text{ \AA}$, число формульних одиниць в елементарній комірці $Z = 4$. Об'єм примітивної комірки $V_{\text{прим}} = abc = 1349,594 \text{ \AA}^3$. У разі охолодження ці кристали мають таку послідовність фазових переходів [1, 2]:

$$G_1(P_{nma})_{T_i = 332,3 \text{ K}} \leftrightarrow G_2(IC)_{T_c = 259,6 \text{ K}} \leftrightarrow G_3(P2_1/n)_{T_1 = 183,4 \text{ K}} \leftrightarrow G_4(P\bar{1}(P1))$$

Структурні дослідження [1] дали змогу з'ясувати, що при $T_i = 332,3 \text{ K}$ відбувається фазовий перехід другого роду з орторомбічної параелектричної фази $G_1(P_{nma})$ в несумірну $G_2(IC)$ з модуляцією вздовж осі a^* ($q = 0,26a^*$). При $T_c = 259,6 \text{ K}$ відбувається *lock-in* фазовий перехід у сегнетоеластичну фазу G_3 моноклінної симетрії (просторова група: $C_{2h}^5 = P2_1/n$; параметри ґратки: $a = 14,859 \text{ \AA}$, $b = 8,359 \text{ \AA}$, $c = 10,693 \text{ \AA}$, $\alpha = 90,00(4)^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$, $Z = 4$) [1].

При $T_1 = 183,4$ К відбувається зниження симетрії кристала Cs₂CdI₄ до триклінної (просторова група: $P\bar{1}(P1)$; параметри ґратки: $a = 14,811$ Å, $b = 8,351$ Å, $c = 10,674$ Å, $\alpha = 90,00(4)^\circ$, $\beta = 90,19(4)^\circ$, $\gamma = 90,20(4)^\circ$, $Z = 8(4)$) [1]. Фаза G_4 є також сегнетоеластичною, з можливим подвоєнням елементарної комірки.

Інша модифікація Cs₂CdI₄ виникає в разі вирощування кристалів з водного розчину [1, 3]. Отримані шляхом повільного випаровування розчину кристали мають моноклінну симетрію з просторовою групою $C_{2h}^2 = P2_1/m$ (структура типу Sr₂GeS₄, модифікація B). Параметри ґратки: $a = 7,807$ Å, $b = 8,416$ Å, $c = 10,986$ Å, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 110,60(9)^\circ$, $\gamma = 90^\circ$, число формульних одиниць в елементарній комірці: $Z = 2$ [1]. Об'єм примітивної комірки $V_{\text{прим}} = abc \sin \beta = 675,623$ Å³.

Кристали типу Sr₂GeS₄ не мають фазових переходів у діапазоні 77–400 К, проте під час нагрівання до $T > 420$ К вони переходять у модифікацію A . Цей процес супроводжується практично повним руйнуванням кристала. З іншого боку, висока гігроскопічність модифікації A кристалів Cs₂CdI₄ спричинює фазовий перехід у модифікацію B , який, імовірно, зумовлений вологою повітря [1].

Ми виконали теоретико-груповий аналіз обох кристалічних структур і дослідили спектр відбивання B модифікації Cs₂CdI₄ в ділянці 10–205 см⁻¹, визначили головні параметри коливних осциляторів, які формують смуги в далекій ІЧ ділянці.

Теоретико-груповий аналіз виконано з використанням методу позиційної симетрії [4, 5] шляхом виділення в примітивній комірці іонів C_s^+ і складних іонних комплексів CdI_4^{2-} . Примітивні комірки кристалів B -Cs₂CdI₄ і A -Cs₂CdI₄ містять дві і чотири формульні одиниці й виконують $3 \cdot 14 = 42$ і $3 \cdot 28 = 84$ коливань, відповідно. Коливання кристалів поділяють на внутрішні коливання іонів CdI_4^{2-} і зовнішні коливання іонів C_s^+ і CdI_4^{2-} . До зовнішніх належать трансляційні коливання іонів цезію, а також трансляційні та орієнтаційні коливання іонних комплексів CdI_4^{2-} . У вільному стані іон CdI_4^{2-} може мати симетрію груп T_d або D_{4h} [5]. Для коректного теоретико-групового аналізу кристалів B і A модифікацій Cs₂CdI₄ для вільного іона CdI_4^{2-} потрібно скористатися симетрією незвідних зображень групи D_{4h} . У цьому разі відповідне механічне зображення M_B розкладається на незвідні: $M_B = A_{1g} + A_{2g} + 2A_{2u} + B_{1g} + B_{2g} + B_{2u} + 3E_u + E_g$. Трансляція іона CdI_4^{2-} як цілого має симетрію $A_{2u} + E_u$, обертання як цілого – симетрію $A_{2g} + E_g$ і внутрішні коливання – $A_{1g} + A_{2u} + B_{1g} + B_{2g} + B_{2u} + 2E_u$. Класифікацію коливань кристалів обох модифікацій Cs₂CdI₄ у методі позиційної симетрії зручно зобразити за допомогою табл. 1 і 2.

В табл. 1, 2 біля символів структурних елементів зазначені їхні кристалографічні точкові групи симетрії у вільному стані, жирні лінії позначають розклад двовимірних зображень на два одновимірні. З табл. 1, 2 отримуємо для B -Cs₂CdI₄ $\Gamma_{\text{внутр}}(2CdI_4^{2-}) = 6A_g + 3B_g + 6B_u + 3A_u$ і $\Gamma_{\text{внутр}}(4CdI_4^{2-}) = 7A_g + 7B_g + 2B_{1u} + 7B_{2u} + 7B_{3u} + 2A_u + 2B_{2g} + 2B_{3g}$ – для A -Cs₂CdI₄.

У трансляційних коливаннях беруть участь як іони цезію, так і іонні комплекси CdI_4^{2-} .

Таблиця 1

Класифікація фундаментальних коливань кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ у методі позиційної симетрії

Колівання структурних елементів			Ізольований структурний елемент	Позиційна симетрія	Фактор-група (C_{2k})
Трансп.	Лібр.	Внутр.			
			$2\text{CdI}_4^{2-} (D_{4h})$	C_3	
1			A_g	A'	$A_g (R_z)$
1			B_{1g}		$B_u (T_x, T_y)$
1			B_{2g}	A'	$B_g (R_x, R_y)$
1	1	2	$(T_x, T_y) E_u$ $(R_z) A_{2g}$		$A_u (T_z)$
1			B_{2u}	A'	
1		1	$(T_z) A_{2u}$		
1	1	1	$(R_x, R_y) E_g$		
			$4\text{Cs}^+ (C_1)$	C_3	
1			$(T_x, T_y, T_z) A$	A_u	

Таблиця 2

Класифікація фундаментальних коливань кристала $A\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ у методі позиційної симетрії

Колівання структурних елементів			Ізольований структурний елемент	Позиційна симетрія	Фактор-група (D_{2k})
Трансп.	Лібр.	Внутр.			
			$4\text{CdI}_4^{2-} (D_{4h})$	C_3	
1			A_g	A'	$A_g (R_z)$
1			B_{1g}		$B_{1g} (R_x)$
1			B_{2g}	A'	$B_{2u} (T_y)$
1	1	2	$(T_x, T_y) E_u$ $(R_z) A_{2g}$		$B_{2u} (T_x)$
1			B_{2u}	A'	$B_{2g} (R_y)$
1		1	$(T_z) A_{2u}$		$B_{2g} (R_x)$
1	1	1	$(R_x, R_y) E_g$		A_u
			$8\text{Cs}^+ (C_1)$	C_3	
1			$(T_x, T_y, T_z) A$	A_u	$B_{1u} (T_z)$

В обертових рухах (лібраціях) можуть брати участь тільки іонні комплекси CdI₄²⁻. Типи обертових коливань $\Gamma_{об}(2CdI_4^{2-}) = A_g + B_u + 2B_g + 2A_u$ для B-Cs₂CdI₄ і $\Gamma_{об}(4CdI_4^{2-}) = A_g + 2B_{1u} + B_{2u} + B_{3u} + B_{1g} + 2B_{2g} + 2B_{3g} + 2A_u$ – для A-Cs₂CdI₄. Отже, типи зовнішніх коливань примітивної комірки кристалів B і A модифікацій Cs₂CdI₄ можна записати так: $\Gamma_{зовн}(B-Cs_2CdI_4) = \Gamma_{трансл}(4C_s^+) + \Gamma_{трансл}(2CdI_4^{2-}) + \Gamma_{об}(2CdI_4^{2-}) = 7A_u + 11B_u + 3A_g + 3B_g$ і $\Gamma_{зовн}(A-Cs_2CdI_4) = \Gamma_{трансл}(8C_s^+) + \Gamma_{трансл}(4CdI_4^{2-}) + \Gamma_{об}(4CdI_4^{2-}) = 3A_g + 3B_{1g} + 3B_{2g} + 3B_{3g} + 3A_u + 11B_{1u} + 11B_{2u} + 11B_{3u}$.

Загалом отримуємо такі типи коливань: $\Gamma_{зар}(B-Cs_2CdI_4) = \Gamma_{внутр} + \Gamma_{зовн} = 10A_u + 17B_u + 9A_g + 6B_g$, $\Gamma_{зар}(A-Cs_2CdI_4) = \Gamma_{внутр} + \Gamma_{зовн} = 5A_u + 13B_{1u} + 18B_{2u} + 18B_{3u} + 10A_g + 10B_{1g} + 5B_{2g} + 5B_{3g}$. З цих коливань потрібно вирахувати три акустичні коливання $\Gamma_{акуст}(B-Cs_2CdI_4) = A_u + 2B_u$ і $\Gamma_{акуст}(A-Cs_2CdI_4) = B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$, які є трьома зміщеними примітивної комірки як цілої. Симетрія C_s складних іонів CdI₄²⁻ у кристаллах B і A модифікацій Cs₂CdI₄ є нижча, ніж симетрія вільних іонів D_{4h}. Тому відбулося Бете-розщеплення вироджених коливань E_g → 2A'' і E_u → 2A'. Крім того, наявність двох іонів у примітивній комірці зумовлює давидівське розщеплення кожного типу симетрії позиційної групи C_s на дві компоненти: A' → A_g + B_u, A'' → B_g + A_u для B-Cs₂CdI₄ і A' → A_g + B_{1g} + B_{2u} + B_{3u}, A'' → B_{2g} + B_{3g} + A_u + B_{1u} – для A-Cs₂CdI₄.

Групи симетрії C_{2h} і D_{2h} кристалів B і A модифікацій Cs₂CdI₄ мають центри симетрії, тому симетричні щодо центра симетрії коливання типів A_g і B_g, B_{1g}, B_{2g}, B_{3g}, згідно з правилом альтернативної заборони, не повинні виявлятися в ІЧ-спектрі, а антисиметричні A_u і B_u, B_{1u}, B_{2u}, B_{3u} – у спектрі комбінаційного розсіяння світла.

Неполяризований спектр відбивання B-Cs₂CdI₄ в ділянці 10–205 см⁻¹ отримано за допомогою фур'є-спектрометра ЛАФС-1000, який автоматизовано з використанням ЕОМ, що давало змогу отримувати інтерферограму за різних значень розділення. Під час вимірювання на фур'є-спектрометрі середнє відхилення отриманих результатів від середнього значення становило 1,3–1,5 % [7]. Розроблено програму, яка давала змогу виконувати швидко фур'є-перетворення інтерферограми із записом отриманих спектрів у файл.

У разі дисперсійного аналізу спектр відбивання $R(\omega)$ обчислювано зі спектра комплексної діелектричної проникності $\varepsilon^*(\omega)$ за формулою [5]

$$R(\omega) = \left[\left| \sqrt{\varepsilon^*} - 1 \right| / \left| \sqrt{\varepsilon^*} + 1 \right| \right]^2. \quad (1)$$

Діелектричну проникність $\varepsilon^*(\omega)$, відповідно, задавали моделлю незалежних загасаючих осциляторів [5]

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty \prod_{n=1}^{N_0} (\omega_{l,n}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_{l,n}) / (\omega_{t,n}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_{t,n}), \quad (2)$$

де ε_∞ – внесок високочастотних коливань у діелектричну проникність; $\omega_{l,n}$, $\omega_{t,n}$ – частоти; $\gamma_{l,n}$, $\gamma_{t,n}$ – коефіцієнти загасання n -го поздовжнього (l) та поперечного (t) коливання, кількість яких дорівнює N_0 .

Сили осциляторів S обчислено із наближеного співвідношення [5]

$$\omega_l - \omega_t \approx S\omega_l / 2\varepsilon_\infty. \quad (3)$$

Внесок високочастотних коливань у діелектричну проникність $\epsilon_{\infty} = 4,45$.

Суть методу дисперсійного аналізу полягає у підборі параметрів співвідношення (2) так, щоб обчислений з (1) спектр якнайліпше збігався з експериментальним. Для прискорення процедури припасування, використано методи автоматичної оптимізації параметрів: у програмному середовищі Turbo Pascal 7,0 розроблено програму, яка виконувала послідовне припасування параметрів співвідношення (2). Точність припасування становила 0,031, її оцінювали мінімізацією середнього модуля відхилення обчисленої кривої за формулою (2) від експериментальної. Початкові наближені параметри $\omega_{l,n}$, $\omega_{h,n}$, $\gamma_{l,n}$ і $\gamma_{h,n}$ брали з експериментального спектра. Для точної оцінки початкових параметрів використовували математичний пакет Microcal Origin 5,0.

Спектр відбивання кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ в ділянці $10\text{--}205\text{ см}^{-1}$ показаний на рисунку 1. У спектрі простежено двадцять три коливні смуги, числові значення TO і LO частот, отримані після дисперсійного аналізу, наведені у табл. 3. Оскільки в кристалах $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ чітко виділяються структурні фрагменти Cs-I і CdI_4^{2-} , то динаміку ґратки можна пов'язати з коливаннями Cs-I і CdI_4^{2-} різновидів, причому деформаційні коливання є в низькочастотній ділянці, а валентні коливання – у високочастотній. Смуги у низькочастотній ділянці з частотами TO коливань: $10,21$; $16,75$; $20,78$; $24,05$; $28,30$; $34,32$; $39,18$; $46,50$; $50,19$; $57,40$; $64,96\text{ см}^{-1}$ можна приписати деформаційним коливанням Cs-I і 2CdI_4^{2-} . В ІЧ спектрі вільної молекули CdI_4^{2-} активне деформаційне коливання з частотою 44 см^{-1} [11]. У цьому разі, згідно з правилом альтернативної заборони активні тільки коливання симетрії $2B_u + A_u$. Три коливання з TO частотами: $50,19$, $57,40$, $64,96\text{ см}^{-1}$, треба зачислити до деформаційних коливань 2CdI_4^{2-} , а оскільки вони лежать в околі 44 см^{-1} , то приписати їм симетрію $2B_u + A_u$. Смуги у високочастотній ділянці з частотами TO коливань: $83,02$; $87,09$; $95,62$; $101,84$; $108,38$; $116,61$; $124,84$; $133,10$; $145,90$; $151,27$; $154,11$; $164,02\text{ см}^{-1}$ можна приписати валентним коливанням Cs-I і CdI_4^{2-} . Смуга в околі $145,90\text{ см}^{-1}$ на рисунку 1, найбільш вірогідно, відповідає внутрішньому валентному коливанню тетраедричних комплексів 2CdI_4^{2-} , оскільки ІЧ спектр вільного іона CdI_4^{2-} містить активне коливання з частотою 145 см^{-1} [11].

Для подальшого аналізу скористаємося трансляційними коливаннями кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$. У разі неполяризованого випромінювання однозначно визначити симетрію трансляційних коливних мод кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ неможливо. Оскільки в разі трансляційних коливань ґратки змінюється взаємне положення центрів мас іонів цезію та іонних комплексів 2CdI_4^{2-} , то їх розглядають як зовнішні коливання кристала, і тому вони мають низькі значення частот. Низькочастотне коливання з TO частотою $10,21\text{ см}^{-1}$ можна віднести до трансляційного коливання кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$.

З використанням значення частоти коливання трансляційного типу для кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$, припускаючи, що йони 2CdI_4^{2-} коливаються як єдине ціле, можна оцінити відносну зміну силової сталої k зв'язку $\text{Cs}^+ - 2\text{CdI}_4^{2-}$.

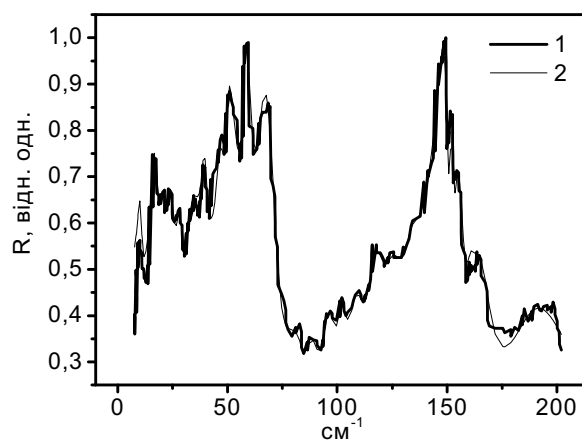


Рис. 1. Нормований експериментальний (1) і теоретичний (обчислений методом дисперсійного аналізу) (2) спектри відбивання *B*-Cs₂CdI₄.

Таблиця 3

Параметри фононів кристала *B*-Cs₂CdI₄, отримані дисперсійним аналізом

ω_t, cm^{-1}	ω_s, cm^{-1}	γ_t, cm^{-1}	γ_s, cm^{-1}	S
10,21	10,98	1,41	3,28	0,67
16,75	17,53	1,39	8,45	0,41
20,78	21,08	1,78	3,12	0,13
24,05	24,85	1,94	4,36	0,30
28,30	29,18	2,18	3,41	0,28
34,32	35,83	4,46	11,90	0,40
39,18	40,30	1,60	4,75	0,25
46,50	48,20	2,15	5,14	0,33
50,19	55,96	1,14	14,40	1,02
57,40	59,90	1,31	7,00	0,40
64,96	72,33	4,72	9,72	1,01
83,02	84,88	13,01	6,15	0,20
87,09	92,76	7,43	9,81	0,58
95,62	98,06	4,29	10,00	0,23
101,84	103,05	4,20	7,32	0,11
108,38	111,82	6,26	11,05	0,28
116,61	121,45	5,26	18,77	0,37
124,84	126,68	7,76	18,34	0,13
133,10	134,00	7,05	15,36	0,06
145,90	150,34	7,41	2,40	0,27
151,27	153,17	2,27	2,86	0,11
154,11	156,88	2,76	7,29	0,16
164,02	167,12	8,26	13,90	0,17

Для цього скористаємося простим співвідношеннями між частотою трансляційного коливання $\omega_{\text{трансл}}$ і його зведеною масою μ :

$$\omega_{mp}^2 = \frac{k}{\mu}; \quad (4)$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (5)$$

де m_1 – маса іона CdI_4^{2-} ; m_2 – маса іона Cs^+ . Для кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ силова стала дорівнює приблизно 0,017 Н/м.

За значенням TO і LO коливань можна обчислити ефективні заряди іонів (заряди Сцигетті). Для цього достатньо використати частоти коливань трансляційного типу і внутрішні коливання тетраедрів 2CdI_4^{2-} . Поперечний модовий заряд можна виразити так [4]:

$$e_T^2 = \frac{\Delta\omega^2 \varepsilon_\infty V_{\text{прим.}}}{4\pi Z^2}, \quad (6)$$

де $\Delta\omega^2 = (2\pi c)^2 (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)$; $V_{\text{прим.}}$ – об'єм примітивної комірки, Z – кількість пар іонів у примітивній комірці.

Іонний заряд e_T^* пов'язаний з модовим таким простим співвідношенням [4]:

$$(e_T^*)^2 = e_T^2 \mu, \quad (7)$$

де μ – зведена маса дипольного коливання. Модовий заряд Сцигетті e_s і поперечний модовий (іонний) заряд e_T^* пов'язані таким співвідношенням [4]:

$$e_T^* = \frac{\varepsilon_\infty + 2}{3} e_s. \quad (8)$$

Співвідношення (7) справджується в разі незалежності внутрішніх і зовнішніх (трансляційних) коливань.

Для обчислення ефективних зарядів іонів Cd^{2+} і Γ скористаємося внутрішніми коливаннями кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ з частотою $145,90 \text{ cm}^{-1}$, а для визначення ефективних зарядів іонів Cs^+ – зовнішнім коливанням з частотою $10,21 \text{ cm}^{-1}$. Отримані ефективні заряди іонів, виражені в одиницях заряду електрона, такі: $\text{Cs}^+ - 0,073$, $\text{Cd}^{2+} - 0,603$, $\Gamma - -0,151$.

Отже, виконано теоретико-груповий аналіз A і B модифікацій Cs_2CdI_4 , а також визначено параметри коливних осциляторів кристала $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$ в далекій ІЧ ділянці методом дисперсійного аналізу. З експериментальних результатів оцінено ефективну силову сталу взаємодії $\text{Cs}^+ - \text{CdI}_4^{2-}$, а також ефективні заряди іонів у кристалі $B\text{-Cs}_2\text{CdI}_4$.

1. Alexandrov K. S., Melnikova S. V., Flerov I. N. et al. Phase Transitions in Cs_2CdI_4 Single Crystals // Phys. Status Solidi (A). 1988. Vol. 105. N 2. P. 441–446.
2. Мельникова С. В., Примак С. В. Кристаллы с несоизмерными фазами Cs_2CdI_4 и Cs_2ZnI_4 // Физика твердого тела. 1992. Т. 34. № 7. С. 2173–2177.

3. *Sjövall R.* Structure of Dicaesium Tetraiodocadmiate (II) // *Acta Cryst. (c)*. 1989. Vol. 45. N 4. P. 667–669.
4. Пуле А., Матве Ж.-П. Колебательные спектры и симметрия кристаллов. М.: Мир, 1973. 437 с.
5. Жижин Г. Н., Маврин Б. Н., Шабанов В. Ф. Оптические колебательные спектры кристаллов. М.: Наука, 1984. 232 с.
6. *International Tables for X-Rays Crystallography*. Birmingham: Kynoch Press, 1974.
7. Волькенштейн И. А. Результаты испытаний лабораторного фурье-спектрометра ЛФС-1000 // *Оптико-механическая. пром-сть*. 1979. № 9. С. 34–36.
8. Белоусов М., Погарев Д. Дисперсионный анализ сложных спектров отражения // *Оптика и спектроскопия*. 1975. Т. 38. № 5. С. 1018.
9. *Sudharsanan R., Clayman B.* Far infrared studies on the superionic conductor Ag₂HgI₄ // *Solid State Ionics*. 1985. Vol. 15. N 1. P. 287–291.
10. *Sudharsanan R., Srinivasan T., Radhakrishna S.* Raman and far IR studies on Ag₂CdI₄ and Cu₂CdI₄ superionic compounds // *Solid State Ionics*. 1984. Vol. 13. N 1. P. 277–283.
11. Накамото К. ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. М.: Мир, 1991. 535 с.
12. Кулай Т. Теоретико-групповий аналіз, спектри КРС та ІЧ-спектри відбивання Ag₂CdI₄ // *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз.* 2001. Вип. 34. С. 359–365.

PHONON SPECTRA OF Cs₂CdI₄ IN FAR INFRARED REGION

T. Kulay

*Ivan Franko Lviv National University, Radiophysic Department,
Tarnavskogo Str., 107, UA-79017 Lviv, Ukraine,
e-mail: kulay@rd.wups.lviv.ua*

This work deals with the group-theoretic analysis of *A* and *B* modifications of Cs₂CdI₄ single crystals. The method of positional symmetry was used. The spectrum *B*-Cs₂CdI₄ in far infrared region was measured. The parameters of oscillators of *B*-Cs₂CdI₄ in far infrared region are determined by a method of dispersion analysis. The value of an effective force coupling constant C_s⁺-CdI₄²⁻ and effective charges of ions in *B*-Cs₂CdI₄ were determined.

Key words: group-theoretic analysis, position symmetry, oscillator, dispersion analysis.

Стаття надійшла до редколегії 27.04.2004
Прийнята до друку 12.05.2004