

Rb - Ca

$RbNO_2 \cdot Ca(NO_2)_2$

ВФ-429-Х

1964

(Тм)

Проценко П. И.
Медведев Б. С.

Ж. Неорг. химии
1964, 9 , 2438-40.

$RbNO_2 \cdot Ca(NO_2)_2$

[Bp-5198-X] 1966

Троценко П. У. и др.

Укр. хим. ж., 1966, 32,
N7, 690-694.

(Tw, T₆₂)

CaRb₂(PO₃)₄

BX-4752

1969

CaRb(PO₃)₂

12 Б742. Рентгенографические данные по соединениям $\text{CaRb}(\text{PO}_3)_3$ и $\text{CaRb}_2(\text{PO}_3)_4$. Диаграмма состояния $\text{Ca}(\text{PO}_3)_2\text{—RbPO}_3$. Henry Yves, Durif André. Données cristallographiques sur $\text{CaRb}(\text{PO}_3)_3$ et $\text{CaRb}_2(\text{PO}_3)_4$. Diagramme d'équilibre $\text{Ca}(\text{PO}_3)_2\text{—RbPO}_3$. «Bull. Soc. franç. minéral. et cristallogr.», 1969, 92, № 5, 484—486 (франц.)

Методом термич. анализа построена диаграмма состояния $\text{Ca}(\text{PO}_3)_2\text{—RbPO}_3$. Зафиксировано наличие 2 соединений $\text{CaRb}_2(\text{PO}_3)_4$ (I) с перитектич. плавлением и $\text{CaRb}(\text{PO}_3)_2$ (II) с конгруэнтным плавлением. Переход $\alpha\text{—}\beta$ полифосфата Rb происходит при 398° в зоне с содержанием $\text{Ca}(\text{PO}_3)_2\text{O—}33$ мол. %. Переход $\alpha\text{—}\beta$ полифосфата Ca обнаружен при 927° в зоне с содержанием от 90 до 100 мол. % $\text{Ca}(\text{PO}_3)_2$. Рентгенографич. изучени-

T_m

X. 1970. 12

ем (метод Вайсенберга, порошка) установлены параметры монокл. решеток: II, a 7,545; b 12,51; c 9,745Å, γ 90°; $Z=4$, ф. гр. Pn , $P2/n$ или $P2_1/n$; I a 11,436; b 13,352, c 7,908Å, γ 101,89°, ф. гр. $P2_1/n$. Для I и II даны таблицы значений I , d , hkl .

Л. И. Ман

Rb - Ca

1969

Ca Rb (PO)

3/3

[60144w Crystallographic data on $\text{CaRb}(\text{PO}_3)_3$ and $\text{CaRb}_2(\text{PO}_3)_4$. Calcium metaphosphate-rubidium metaphosphate phase diagram. Henry, Yves; Durif, Andre (Lab. Electrostatique Phys. Metal, C.N.R.S., Grenoble, Fr.). *Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr.* 1969, 92(5), 484-6 (Fr). The title equil. diagram was detd. by DTA. There are 2 defined compds.: $\text{CaRb}_2(\text{PO}_3)_4$ with peritectic melting and $\text{CaRb}(\text{PO}_3)_3$ with congruent melting. The α - β transformations of Rb and Ca metaphosphates occur at 398 and 927°, resp. $\text{CaRb}_2(\text{PO}_3)_4$ has lattice consts. of a 7.545, b 12.51, c 9.745 Å, and γ 90°; $Z = 4$. $\text{CaRb}_3(\text{PO}_3)_4$ is monoclinic with lattice consts. a 11.436, b 13.352, c 7.908 Å, and β 101.89°; $Z = 4$. BGJF

T_m

+2

C.A. 1970

72.12

IX - 3026

1969

Самоуч-Рв Сл (Тм)

Коллин А.В., Крюкова А.И.,
Корнищев И.А.

Тр. по хим. и хим. технол., 1969, №3,
43-5 (Зороковск.  университет).

BPK-6576

1969

Seifert H. G.,
Langenbach, U.

~~Rb₃CaCl₇~~

Rb₃CaCl₇
~~Rb₃CaCl₇~~

T_m

Z. anorgan. und allgem.
Chem., 368, 1-2, 36-43.

(neu. CsCaCl₃) I

Rb(NO₂) · Ca(NO₂)₂

1970

ВФ - 306 - IX

9 Б816. Твердые растворы в системах K, Rb, Cs||NO₃, Rb, Tl, Ca||NO₂, Rb, Cs, Ca||NO₂. Проценко П. И., Шмелькова Г. Ф. В сб. «Гетероген. равновесия в нитритн. и нитратн. системах». Элиста, 1970, 66—80

Визуально-политермическим; термографич. и рентгенографич. методами изучено равновесие в тройных системах K, Rb, Cs||NO₃; Rb, Tl, Ca||NO₂ и Rb, Cs, Ca||NO₂. Показано, что в системе K, Rb, Cs||NO₃ тройные тв. р-ры при конц-ии RbNO₃ < 45% не стабильны при 245°. С ростом конц-ии RbNO₃ тройные р-ры становятся стабильными. В системе отсутствует роиная инвариантная

Т_{ин}

+2

X. 1971.9



точка. Для системы Rb, Tl, Ca||NO₂ отмечена тенденция к образованию соединений: конгруэнтно плавящегося $\text{Rb}(\text{NO}_2) \cdot \text{Ca}(\text{NO}_2)_2$ и инконгруэнтно — $\text{Tl}(\text{NO}_2) \cdot \text{Ca}(\text{NO}_2)_2$. Эти соединения дают тройные тв. р-ры. В системе Cs, Rb, Ca||NO₂ также имеется область первичной кристаллизации тройных тв. р-ров, образуемых соединениями $\text{Rb}(\text{NO}_2) \cdot \text{Ca}(\text{NO}_2)_2$ и $\text{Cs}(\text{NO}_2) \cdot \text{Ca}(\text{NO}_2)_2$. Отмечено также поле инконгруэнтно плавящегося соединения $5\text{CsNO}_2 \cdot \text{Ca}(\text{NO}_2)_2$.

И. Магидсон

Rb Ca Cl

1970

3 13 Б516. О хлорокальцитах рубидия и цезия. Со-
рокина В. В., Смирнова Е. К., Василько-
ва И. В. «Ж. неорганич. химии», 1970, 15, № 2, 577—578

Определена энтальпия образования конгруэнтно пла-
вящихся RbCaCl_3 (I) и CsCaCl_3 (II), синтезированных
нагреванием эквимол. смесей CaCl_2 и RbCl (CsCl) в
течение 10 час. при t -ре $10-20^\circ$ выше t -ры пл., и про-
ведено рентгенографич. исследование (метод порошка,
 $\lambda\text{Cu-K}\alpha$ и $\text{Ni-K}\alpha$) этих соединений. При расчете энталь-
пии растворения эквимолек. смеси хлоридов для случая
I получено значение: $-15,61$ ккал; для случая II —
 $-15,31$. Значение энтальпии образования из хлоридов I
и II составляет 5,9 и 8,7, из простых веществ — 298,8.

ΔH_f°

X. 1970.

13

(H)

ⓧ

302,2, соотв. Установлено, что кристаллы II обладают структурой типа перовскита с параметром кубич. решетки a 5,40; ρ (эксп.) 2,98, ρ (выч.) 2,94. Структура I несколько отличается от структуры II и не принадлежит к кубич. симметрии. Приведено графич. изображение (штрихдиаграммы) рентгенограмм порошка I.

С. В. Рыкова

1970

RbCaCl₃

~~115360w~~ Rubidium and cesium chlorocalcites. Sorokina,
 V. N.; Smirnova, E. K.; Vasil'kova, I. V. (USSR). *Zh.
 Neorg. Khim.* 1970, 15(2), 577-8 (Russ). Congruently melting
 RbCaCl₃ and CsCaCl₃ were prep'd. in an autoclave. The x-ray
 powder diffraction pattern of RbCaCl₃ is given. ΔH of formation
 of MCaCl₃ from the corresponding chlorides is 5.9 and 8.7 and
 from elements 298.8 and 302.2 kcal/mole for M = Rb and Cs,
 resp. ΔH of dissoln. of equimolar concns. of RbCl and CaCl₂ is
 -15.61 and of CsCl and CaCl₂ -15.31 kcal/mole. HMJR

 ΔH_f

C.A. 1970. 72.22

RbCl₃

Markov B. P.;
et al.

1972

"Ukr. Khim. Zh."

(ΔHf)

1972, 38 (8), 823-5.

● (cr. RbCl; I)

RbCaP₃O₉ Вр - 4487-IX 1973

Сераямгунов Д.З
и др.

(Тм) Мр. ии-ма зем. 
Наук АН Каз. ССР.

1973, 36 18-25

1974

RbCaF₃

2 E530. Фазовые превращения в RbCaF₃. Modine F. A., Sonder E., Unruh W. P., Finch C. B., Westbrook R. D. Phase transitions in RbCaF₃. «Phys. Rev. B: Solid State», 1974, 10, № 4, 1623—1634 (англ.)

фазов.
переход

Исследованы диэлектрич. свойства, оптич. двулучепреломление, теплоемкость и спектр ЭПР примесей Fe³⁺ монокристаллов RbCaF₃, выращенных методом Бриджмена. При комнатной т-ре кристаллы имеют кубич. структуру типа перовскита. При охлаждении ниже 198° K наблюдается переход в тетраг. фазу с четко выраженной доменной структурой. Фазовый переход, аналогичный антисегнетоэлектрич. превращениям в SrTiO₃ и KMnF₃, близок к переходу второго рода. Обнаружены признаки неизвестных фазовых переходов вблизи 43 и 10° K.

В. Половов

ф. 1975 №2

RbCaF₃

(T_{tr})

C.A. 1974. 81

N20

127833b Phase transitions in rubidium calcium fluoride. Modine, F. A.; Snoder, E.; Unruh, W. P.; Finch, C. B.; Westbrook, R. D. (Solid State Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Phys. Rev. B* 1974, 10(4), 1623-34 (Eng). Single crystals of RbCaF₃ have been successfully prepd. by the Bridgman method. The crystals have a cubic perovskite structure at ambient temp., but the structure is of lower symmetry at <198°K. At lower temps. the polarizing microscope reveals optical birefringence and well-defined domain structure. Detailed measurements of the birefringence and the paramagnetic resonance of impurity Fe³⁺ show a transformation to a tetragonal structure at 198°K. This phase transition is at least near 2nd order and appears similar to the antiferroelec. transitions known in SrTiO₃ and KMnF₃ (the latter has a small 1st-order contribution) except very near T_c where it differs from both. The measurements imply a temp. variation of the transition order parameter that is described by a crit. index β which is close to 0.25 very near T_c, roughly 0.33 at somewhat lower temp., and 0.50 or Landau-like at still lower temps. Preliminary measurements of the dielec. function and sp.-heat anomalies have also been made. Only small anomalies were found at 198°K. However, these measurements along with the paramagnetic-resonance measurements suggest that other phase transitions occur, at ~43° and 10°K.

1975

RbCaF₃

(Ttr)

-/S4: 67264s Phase transitions in rubidium calcium fluoride (RbCaF₃). I: Optical studies. Bates, J. B.; Major, R. W.; Modine, F. A. (Solid State Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Solid State Commun.* 1975, 17(11), 1317-5. (Eng). Phase transitions in RbCaF₃ were investigated by optical birefringence measurements and Raman scattering expts. A new discontinuity in the onset of spontaneous birefringence at 196°K shows that the cubic to tetragonal phase change is "slightly" first order. The Raman spectra of the tetragonal phase support a D_{4h}^{18} structure in which 2 phonons of A_{1g} and E_g symmetry soften as the 196°K transition is approached from lower temps. A very slow transition to a lower symmetry structure was obsd. at about 42°K in the Raman measurements.

C.A. 1976, 84 N1C

RbCaF₃

(T_{tr})

Ф 1976 NS

5 E765. Фазовые переходы в RbCaF₃. 1. Оптическое изучение. Bates J. B., Major R. W., Modine F. A. Phase transitions in RbCaF₃. 1. Optical studies. «Solid State Commun», 1975, 17, № 11, 1347—1350 (англ.)

По температурной зависимости двойного лучепреломления в монокристаллах RbCaF₃ определена т-ра фазового перехода (ФП) кубич. решетки в тетрагональную: $T_0 \approx 196^\circ \text{K}$. Температурная зависимость Δn в интервале $176—196^\circ \text{K}$ описывается соотношением $\Delta n = A \cdot (T_0 - T)^{2\beta}$, где $A = (1,19 \pm 0,01) \cdot 10^{-4}$, $\beta = 0,29 \pm 0,01$ и $T_0 = 196,9 \pm 1^\circ \text{K}$. При т-ре ФП происходит небольшое скачкообразное изменение Δn , указывающее на принадлежность ФП к «слабым» переходам 1-го рода. Об этом свидетельствует и температурный гистерезис ($0,15^\circ \text{K}$) ФП при охлаждении и нагреве. Спектры комб. рас. света, снятые в интервале $205—10^\circ \text{K}$, выявили наличие двух мягких мод норм. колебаний (A и E_g) в тетраг. фазе (D_{4h}^{18}), частота которых уменьшается при приближении к 196°K . При т-ре 42°K наблюдалось изменение спектров комб. рас., указывающее на 2-й ФП 1-го рода, приводящий к понижению симметрии при охлаждении. Низкотемпературный ФП характеризуется очень медленным развитием во времени.

И. Разумовский

1975

RbCaF₃

1975

11 Б1170. Фазовые переходы в RbCaF₃. I. Изучение оптическими методами. Bates J. B., Major R. W., Modine F. A. Phase transitions in RbCaF₃. I. Optical studies. «Solid State Communs», 1975, 17, № 11, 1347—1350 (англ.)

Фазовые превращения (ФП) в RbCaF₃ (I) изучали методами измерения оптич. двойного лучепреломления (ДЛ) и КР. Отмечен скачок значений ДЛ ~196 К при ФП кубич. в тетрагон. фазу, к-рый является заметным переходом II-го рода. При этом наблюдали гистерезис т-ры 0,15 К. В интервале т-р 196—176 К ДЛ описывается ур-нием $\Delta n = A(T_0 - T)^{2\beta}$, где $A = (1,19 \pm 0,11) \times 10^{-4}$; $\beta = 0,29 \pm 0,01$; $T_0 = 196 \pm 1$, причем T_0 на $0,9 \pm 0,2$ К выше т-ры перехода. Разница в найденных значениях β и опубликованных ранее объясняется анизотропными флуктуациями. В интервале т-р 160—80 К ДЛ изме-

(T_{tr})

x 1976 №11

няется линейно в соответствии с 3-м законом термодинамики. Измерения КР проводили в плоскости [100] кристаллов I при t -рах 205—10 К. При 60 К амплитуда фононов A_{1g} и $\bar{E}_g$ составляет 80 и 23 см^{-1} , а коэф. ширины полосы пика частоты соотв. 0,11 и 0,26. При 75 К эти коэф. изменяются до 0,19 и 0,30. В интервале 145—80 К t -рная зависимость моды колебаний E_g характеризуется крит. показателем $\beta = 0,5 \pm 0,1$ и экстраполируется в нуль в точке выше t -ры перехода. Структура тетрагон. фазы, определенная методом КР, является D_{4h}^{18} . При t -ре 42 К наблюдался очень замедленный (до 100 мин.) переход к структуре с высокой симметрией. Отмеченный при этом термич. гистерезис объяснен чрезвычайно низкой скоростью перехода при t -ре вблизи 41 К.

М. С. Зухер

$2RbBr \cdot CaBr$ Шварцов И.И. 1975
Давранов М., "гр.
" М. морск. химии "
(Tm) 1975, 20, N1, 232-234.

(см $LiBr \cdot RbBr$; I)

RbCl · CaCl₂

1975

(Tm)

121652m Lithium chloride-rubidium chloride-calcium chloride system. Ilyasov, I. I.; Davranov, M.; Rodionov, A. I. (USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1975, 20(7), 1999-2001. (Russ). The CaCl₂-RbCl-LiCl system is described in terms of triangular sections with RbCl.CaCl₂ (congruently m.) or LiCl.2CaCl₂ (incongruently m.). The ternary invariant points are 270 and 463 (eutectics) and 475° (peritectic) at Li₂Cl₂ 52, 42, 37, Rb₂Cl₂ 43, 6, 6, and CaCl₂ 5, 52, 57 equiv.%, resp. The RbCl.CaCl₂-Li₂Cl₂ section is quasi-binary with a eutectic point at 500°. The 270 and 463° eutectic melts are of interest as low melting electrolytes.

⊕ ⊗

LiCl · 2CaCl₂

C.A. 1975. 83 N 14

RbCaF₃

1975

11 Б706. Фазовые переходы в RbCaF₃. II. Рассеяние нейтронов. Kamitakahara W.A., Rotter C.A. Phase transitions in RbCaF₃. II. Neutron scattering. «Solid State Commun», 1975, 17, № 11, 1350—1354 (англ.)

Методом неупругого рассеяния нейтронов на трехкристальном спектрометре исследованы особенности динамики решетки RbCaF₃ вблизи границы фазовой устойчивости. Установлено, что фазовый переход при $T_c = 196^\circ \text{K}$ обусловлен «конденсацией» мягкой моды R_{25} (граница зоны Бриллюэна в направлении [111] для кубич. решетки). При T -рах выше точки фазового перехода обнаружено направление распространения мягких фононов, проходящее через границу зоны в направлении [110] (точка M) и точку R . Предполагается, что полученное в эксперименте быстрое уменьшение интенсивности рассеянных нейтронов в точке M при T -рах ниже T_c , свидетельствует о стабилизации решетки, к-рая сопровождается увеличением частоты колебания M_3 . По резюме

(T_{tr})

2 1976
~ 11

RbCaF₃

фазовые
переходы

Ф 1976 N 5

1975

5 E766. Фазовые переходы в RbCaF₃. 2. Рассеяние нейтронов. Kamitakahara W. A., Rotter C. A. Phase transitions in RbCaF₃. II. Neutron scattering. «Solid State Commun», 1975, 17, № 11, 1350—1354 (англ.)

Фазовый переход (ФП) в RbCaF₃ при $T_0 = 196^\circ \text{K}$ исследован нейтронографич. методом. Дисперсионные кривые, построенные при комнатной т-ре, указывают на низкую частоту норм. колебаний, соответствующих точкам R и M зоны Бриллюэна (ЗБ). При приближении к T_0 происходило появление и увеличение интенсивности центрального пика ($\omega = 0$) в точке R, указывающее на конденсацию моды R_{25} , с которой и связывается ФП в RbCaF₃ при $T_0 = 196^\circ \text{K}$. Выше T_0 наблюдалось квазиупругое рассеяние в области, соединяющей точки R и M ЗБ («хребет»), однако в точке M интенсивность рассеяния на несколько порядков меньше такового в точке R. Ниже T_0 происходило быстрое уменьшение интенсивности рассеяния в точке M, свидетельствующее о стабилизации кристаллич. решетки. Вблизи низкотемпературного ФП в данном соединении ($T_c = 42^\circ \text{K}$) изменения характера рассеяния нейтронов не обнаружено. Ч. I см. реф. 5E765. И. Разумовский

RbCaF₃

1975

(Tr)

84: 52370z Phase transitions in rubidium calcium fluoride (RbCaF₃). II: Neutron scattering. Kamitakahara, W. A.; Rotter, C. A. (Solid State Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Solid State Commun.* 1975, 17(11), 1350-4 (Eng). The 196°K phase transition of RbCaF₃ was identified as a phonon condensation at the *R* point (cubic [111] zone boundary). Above the transition temp. a scattering ridge extending from the [110] zone boundary (*M* point) to the *R* point was obsd., corresponding to a line of soft phonons from *M*₃ to *R*₂₅. Below the transition the scattering at *M* decreases rapidly with temp., indicating a lattice stabilization which causes the scattering ridge disappear.

C.A. 1976 84 N8

RbNO₃ и Cs(NO₃) | X 7619 - 34 | 1975
CsNO₃ и Cs(NO₃) (T minc)

Тоновская Н.П., Симограков В.Г.,
Траценко Л.И.

Ж. прикл. химии, 1975, 48, №1, 217-219

Колесник
1975

Журнал
5 (9)

RbCaF₃

из-11549 1976

6 E364. Теплоемкость RbCaF₃ ниже 300° K. Ho James C., Unruh W. P. Specific heat of RbCaF₃ below 300° K. «Phys. Rev. B: Solid State», 1976, 13, № 1, 447—450 (англ.)

(ср)

Измерения проведены в интервале т-р 2—260° K с помощью адиабатич. калориметра. При 198° K обнаружен фазовый переход 1-го рода со скрытой теплотой 36 дж/моль. При ~50° K найдена аномалия теплоемкости типа широкого максимума (тепловой эффект ~7 дж/моль). Вблизи ~7° K имеет место слабая аномалия, соответствующая фазовому переходу высокого порядка. Библ. 21.

Ф 1976 N 6

RbCaF₃

X 4-14712

1976

4 Б1045. Фазовый переход в RbCaF₃ при 193 К. Ri-
dou C., Rousseau M., Gesland J. Y., Nouet J.,
Zarembowitch A. The 193 K phase transition in
RbCaF₃. «Ferroelectrics», 1976, 12, № 1—4, 199—200
(англ.)

Проведены рентгенографич. и КР-спектральное иссле-
дования структурного фазового перехода в RbCaF₃ при
 $T_c = 193$ К, сопровождающегося возникновением тетра-
гон. искажения решетки. Полученные данные свидетель-
ствуют о том, что переход связан с конденсацией одной
из колебательных мод в точке R кубич. зоны Бриллюэ-
на, а T -ная зависимость параметра порядка ниже T_c ,
полученная из относит. искажения решетки, описывается
степенной ф-цией с показателем $\beta = 0,33$. А. Ю. Румянцев

T_c

X. 1977. N4

RbCaF₃

1976

X 8-14712

(T_{tr})

86: 36476z The 193°K phase transition in rubidium calcium fluoride. Ridou, C.; Rousseau, M.; Gesland, J. Y.; Nouet, J.; Zarembowitch, A. (Lab. Phys. Etat Condens., Fac. Sci., Le Mans, Fr.). *Ferroelectrics* 1976, 12(1-4), 199-200 (Eng). Raman and x-ray crystallog. studies show that the 193°K phase transition in RbCaF₃ is caused by condensation of 1 of the vibrational modes assocd. with the *R*-point of the cubic Brillouin zone. Below the Curie temp. the temp. dependence of the order parameter which is the rotation angle of the CaF₆ octahedra around a [100] pseudocubic axis is well described by the crit. exponent $\beta = 0.33$.

C.A. 1977. 86. 6

RbCaF_3

X-14712

1976

2 E725. Фазовый переход при 193°K в RbCaF_3 .
Ridou C., Rousseau M., Gesland J. Y.,
Nouet J., Zarembowitch A. The 193°K phase
transition in RbCaF_3 . «Ferroelectrics», 1976, 12, № 1-4,
199—200 (англ.)

Рентгеновским методом измерена температурная за-
висимость параметров решетки кристалла RbCaF_3 в
интервале т-р $45\text{—}300^\circ\text{K}$. Показано, что при 193°K
происходит фазовый переход из кубич. фазы в тетра-
гональную. Температурная зависимость степени тетра-
гональности $(c - a)/a$ отвечает критич. индексу

(T_c)

Ф 1977 N2

$\beta \pm 0,33$. Показано, что при переходе в тетраг. фазу в спектре комбинац. рассеяния 1-го порядка возникают 7 линий. Совокупность кристаллографич. и спектроскопич. данных согласуется с пространственной группой D_{4h}^{18} .

Н. Р. Иванов

RbCaF₃

ВХ-39

1976

1) 11 E689. Изучение фазового перехода в RbCaF₃ методом комбинационного рассеяния света. Rushworth A. J., Ryan J. F. Raman scattering study of phase transitions in RbCaF₃. «Solid State Communs», 1976, 18, № 9—10, 1239—1241 (англ.)

фазов.
переход

Исследован СКР RbCaF₃ в области т-р от 4 до 200° К. Обнаружены два колебания (типа A_{1g} и E_g), имеющие характер мягких мод: при приближении к 200° К частоты этих колебаний снижаются. Авторы связывают существование мягких мод с предполагаемым в RbCaF₃ при T = 200° К структурным переходом из тетрагональной в кубич. модификацию.

ф. 1976 № 18

RbCaF_3

1976

23 Б1008. Исследование рамановского рассеяния при фазовом переходе в RbCaF_3 . Rushworth A. J., Ryan J. F. Raman scattering study of phase transitions in RbCaF_3 . «Solid State Communs», 1976; 18, № 9—10, 1239—1241 (англ.)

(Т_{tr})

В интервале т-р от 200 К до т-ры жидк. гелня исследованы спектры КР RbCaF_3 , обладающего кубич. перовскитной структурой при комн. т-ре. Представлены т-рные зависимости частот мягких мод A_{1g} и E_g , а также т-рные зависимости их ширины. Показано, что при 200 К происходит фазовое превращение из кубич. модификации в тетрагон., аналогичное фазовому пере-

Х. 1976, №23

ходу в SrTiO_3 и KMnF_3 . С увеличением t -ры наблюдается уменьшение энергии мод A_{1g} и E_g и возрастание ширины, причем мода A_{1g} критически затухает при 160 К, а t -рная зависимость ее ширины обладает минимумом при t -ре около 50 К. Предположено, что при низких t -рах наблюдаемые спектры соотв-ют крист. симметрии D_{4h} . На основе необычного поведения моды A_{1g} сделан вывод о появлении новой низкочастотной моды A_1 симметрии при 45 К. С учетом ЭПР данных и результатов диэлектрич. исследований предложено возможное объяснение природы переходов при 200 и 45 К.

Г. Л. Апарников

1976
 $RbCaCl_3$ Tishura T.A., Budarina A.N.

(K guccers.)
 ΔH_f Ukr. Khim Zh., 1976,
42(3), 280-2.

● (an $KCaCl_3$) I

1976

RbCaF₃ Viswanathan R.,
Ho J.C.

Cp Report 1975, BNL-20805;
7. From Nucl. Sci. Abst. 1976,
33 (9) N20620

● (cell V₃Si)

$RbCaF_3$

1977

6 Б509. Фазовый переход в $RbCaF_3$ при $193^\circ K$. II Критическое рассеяние нейтронов. Almagas R., Rousseau M., Gesland J. Y., Nouet J., Hennion B. The 193 K phase transition in $RbCaF_3$: II. Critical neutron scattering. «J. phys.» (France), 1977, 38, № 11, 1429—1434 (англ.; рез. франц.)

Методом неупругого когерентного рассеяния нейтронов на трехосном спектрометре исследована динамика крист. решетки $RbCaF_3$ вблизи фазового перехода ($T_c = 193^\circ K$) из кубич. в тетрагон. структуру. В точке R_{25} обнаружен центральный пик, резко возрастающий при подходе к т-ре перехода. При разных т-рах определены параметры, характеризующие анизотропию дисперсии в окрестности мягкой моды R_{25} . Из анализа эксперим. данных и сравнения их с расчетом вычислены характеристики функции спектрального отклика. Получены т-рные зависимости частоты мягкой моды и параметра, характеризующего центральный пик. Часть I см. пред. реферат.

П. П. Паршин

T_c

2, № 6, 1978

RbCaF₃

1977

T_{tr}

88: 43854r The 193 K phase transition in rubidium calcium trifluoride: II. Critical neutron scattering. Almairac, R.; Rousseau, M.; Gesland, J. Y.; Nouet, J.; Hennion, B. (Inst. Max Von Laue-Paul Langevin, Grenoble, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1977, 38(11), 1429-34 (Eng). High-resoln. inelastic neutron scattering was studied near the 193 K (T_c) cubic-tetragonal phase transition in RbCaF₃. A divergent temp.-dependent central peak was obsd. at $q = q_R$. The parameters λ_1 , λ_2 , and λ_3 characterizing the anisotropy of the dispersion map in the vicinity of the R_{25} mode were measured at different temps. Taking into account the large anisotropy of the dynamical structure factors of the 3 modes belonging to the R_{25} soft mode, the 4 unknown parameters (A , ω_{∞}^2 , Γ , δ^2) of the spectral response used by Shapiro et al. (1972) in SrTiO₃ were detd. by fitting the calcd. scans with the exptl. ones. The temp. dependences of ω_{∞}^2 and δ^2 are reported; δ^2 decreases with increasing ($T - T_c$). The validity of the q and T dependence of the spectral response function is discussed.

C.A., 1978, 88, 116

$RbNO_3 \cdot Ca(NO_3)_2$ [BQP-1166-BX] 1977

Думаева Т. И.

и др.

(Тм)

Ж. неорг. химии,
1977, 22 (12), 3335-37

(см. $2RbNO_3 \cdot NaNO_3$; I)

$Rb_2Ca_2(SO_4)_3$ Hikita T. et al 1977

J. Phys. Soc. Jap., 1977, 43/4,
1327 - 31.

Tt_2


(cur. $(Mg)_2$ $Sc_2(SO_4)_3$) T

RbCaF_3

1974

T+2

1 6 Б322. Точное определение параметров кристаллической решетки в области фазового превращения RbCaF_3 , сопровождающегося изменением симметрии от кубической до тетрагональной. Ridou C., Rousseau M., Freund A. Détermination précise des paramètres cristallins au voisinage du changement de phase cubique quadratique dans RbCaF_3 . «J. phys. Lett.» (France), 1977, 38, № 17, 359—363 (франц.; рез. англ.)

Рентгенографическое определение (методы порошка и монокристалла, дифрактометр) параметров решетки RbCaF_3 в интервале т-р 200—140° К показало, что переход от кубич. к тетрагон. фазе, имеющий место при т-ре 194° К, является фазовым переходом первого рода. Коэф. линейного расширения $\Delta a_{\text{куб}}/\Delta T$ равен $7 \cdot 10^{-5} \text{ А} \cdot \text{К}^{-1}$. Явная асимметрия пика 004 при 194,5° К трактуется как следствие микроменной структуры тетрагон. фазы.

С. В. Соболева

X, № 1078

1977

RbCaF₃

Tr

88: 43871u The 193 K phase transition in rubidium calcium trifluoride: I. Lattice dynamics. Rousseau, M.; Nouet, J.; Almairac, R. (Lab. Phys. Etat Condense, Fac. Sci., Le Mans, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1977, 38(11), 1423-8 (Eng). The squared frequency of the R_{25} soft mode was calcd. as a function of the interat. force consts. of a rigid-ion model. Anal. expressions of the parameters characterizing the anisotropy of the dispersion surface near the R_{25} mode are given. The calcd. low-frequency dispersion branches are compared with the available exptl. data. All these results are discussed in terms of CaF₆ octahedron rotations.

C.A., 1977, 22, 16

RbCaF_3

1977

6 Б508. Фазовый переход при 193°K в RbCaF_3 . I. Динамика решетки. Rousseau M., Nouet J., Al-mairac R. The 193 K phase transition in RbCaF_3 : I. Lattice dynamics. «J. phys.» (France), 1977, 38, № 11, 1423—1428 (англ.; рез. франц.)

Для описания динамики решетки RbCaF_3 (I) со структурой перовскита, использована модель жестких ионов. Рассчитаны дисперсионные соотношения для акустич. и низколежащих оптич. фононных ветвей в основных сим. направлениях решетки I и получено хорошее согласие с экспериментом. Описано поведение мягкой

T_{tr}

2, № 6, 1978

R_{25} -моды вблизи т-ры фазового перехода из кубич. в тетрагон. структуру ($T_c = 193^\circ \text{K}$). Выведены аналитич. выражения для параметров, характеризующих анизотропию дисперсии Γ в окрестности точки R_{25} . На основе расчетов динамики решетки вычислены динамич. структурные факторы. Полученные результаты интерпретированы на основе представления о повороте CaF_6 -октаэдров вокруг оси $[100]$.

П. П. Паршин

$\text{CaCl}_2 \cdot \text{RbCl}$

1977

Savin D.D. et al.

Zh. Fiz. Khim. 1977,
51(5), 1271-2 (Russ).

(SH₊)

(see $\text{CaCl}_2 \cdot \text{CsCl}$; I)

RbCaF₃

1977

Viswanathan R., et al

(Tr; C)

Ferroelectrics 1977, 17(1-2),
339-40 (Eng)

Cur. D₃ Si - I

RbCaF₃

ВХ-1261

1978

18 Б892. Исследование методом бриллюэновского рассеяния структурного фазового перехода в TiCdF_3 и RbCaF_3 . Berger J., Hauret G., Rousseau M. Brillouin scattering investigation of the structural phase transition of TiCdF_3 and RbCaF_3 . «Solid State Commun», 1978, 25, № 8, 569—571 (англ.)

В интервале т-р 80—500 К исследовано бриллюэновское рассеяние фторперовскитов TiCdF_3 и RbCaF_3 испытывающих структурные фазовые переходы C_{4h}^{1-} — D_{4h}^{18} при 191 и 193 К соотв. Измерены упругие постоянные, т-рные зависимости скоростей продольных и сдвиговых волн и т-рные зависимости затухания продольных фононов. Показано, что вблизи переходов измеренные параметры носят крит. характер, однако крит. экспоненты не вычислены.

Г. Л. Апарников

фазовый
переход

Ттз

(1) 14

2.1978, № 18

BX-1643

1978

Chabin M., et al

Rb CaF₃

Phys. Status Solidi A

1978, 48(1), 67-70

Cp

T_{LN}

(Cul Tl Cd F₃; I)

$RbClF_3$

1978

Гусанов А. Т. и др.

5-й Всес. симпозиум по химии,
орган. синтезу, Днепро-
петровск, 1978, М. 194.

см. $KNiF_3-I$

ВХ-1763

1978

RbCaF₃

6 E685. Нейтронографическое изучение перехода кубического RbCaF₃ в тетрагональную фазу. Maetz J., Müllner M., Jex H. The Cubic to Tetragonal Phase Transition in RbCaF₃ Studied with Neutron Diffraction. «Phys. status solidi», 1978, A50, № 1, K117—K121 (англ.)

кристал.
структ.

На порошковых образцах RbCaF₃ проведены нейтродифракционные исследования, результаты которых позволяют определять угол вращения и тетраг. искажение одновременно и независимо. Показано, что температурное изменение угла вращения октаэдров CaF₆ подчиняется закону $\varphi = \varphi_0(T_0 - T)^\beta$, где $\beta = 0,25$ (1), $T_0 = 197$ (1)°K, $\varphi_0 = 2,24$ (3)°. Изучена температурная зависимость тетраг. искажения. Из анализа длин связи Ca—F получено, что наибольшая деформация электронных оболочек наблюдается в точке перехода.

А. А. Меликьян

Ф.194916

RbCaF_3

1978
9 Б764. Исследование с помощью нейтронной дифракции фазового перехода кубический-тетрагональный в RbCaF_3 . Maetz J., Müller M., Jex H. The cubic to tetragonal phase transition in RbCaF_3 studied with neutron diffraction. «Phys. status solidi», 1978, A50, № 1, 117—121 (англ.)

(Тех)



2.1978.19

В диапазоне t -р от комн. до 60°K , на длине волны $1,0156 \text{ \AA}$, в области углов отражения $10^\circ \leq 2\theta \leq 105^\circ$ проведены нейтронографич. исследования порошкообразных образцов RbCaF_3 . Получено 202 рефлекса. Структурные параметры и факторы t -рной анизотропии получены с учетом анализа профиля линий и влияния поглощения. Найдено, что переход из кубич. фазы $Pm\bar{3}m$ в тетрагон. $I4/mcm$ происходит при $T_0 = 197 \pm 1^\circ \text{K}$. Зависимость угла вращения октаэдров CaF_6 при приближении к T_0 описывается выражением: $\varphi = \varphi_0 (T_0 - T)^\beta$ с $\beta = 0,25 \pm 1$ и $\varphi_0 = 2,24^\circ$. Представлены графики зависимости параметров ячейки обеих фаз от t -ры. Отмечено, что закон $(c - a)/a = 1,5 \varphi$, полученный в предположении о неизменности объема и жесткости октаэдров CaF_2 , не подтверждается экспериментально. Показано, что длина связи $\text{Ca}-\text{F}$ проходит через минимум при T_0 , соотв-щий максим. деформации электронных оболочек.

Г. Л. Апарников

RbCaF_3

фазов.
переход

1978

3 E659. Мёссбауэровское исследование критического рассеяния при структурном фазовом переходе в RbCaF_3 . Maetz J., Butt N. M., Jex H., Müller M. Investigation of the critical scattering at the structural phase transition in RbCaF_3 using Mössbauer diffraction. «Phys. Lett.», 1978, A68, № 1, 87—89 (англ.)

Высокое разрешение мёссбауэровского γ -излучения использовано для сепарирования упругой и неупругой компоненты рассеяния вблизи т-ры структурного фазового перехода в RbCaF_3 . Измерены интенсивности упругого I_{el} и неупругого I_{inel} рассеяния 14,4 кэв γ -излу-

ф. 1979, № 3

чения от узла $1/2(311)$ обратной решетки. $I_{el} \sim (T_0 - T)^{2\beta}$
 $I_{inel} \sim T(T_0 - T)^{2\beta}$, $\beta = 0,25$, $T_0 = 196^\circ \text{ K}$. Температурные за-
висимости обеих интенсивностей находятся в согласии
с предыдущими экспериментами по дифракции нейтро-
нов и электронному парамагнитному резонансу. Выше
т-ры перехода неупругое рассеяние обусловлено пере-
демпфированной мягкой модой в R -точке зоны Брил-
люэна, ответственной за вращение октаэдров фтора.

Б. Е. Вугмейстер

RbCaF₃

1978

89: 189196v Investigation of the critical scattering at the structural phase transition in rubidium calcium fluoride using Moessbauer diffraction. Maetz, J.; Butt, N. M.; Jex, H.; Muellner, M. (Inst. Kernphys., Johann Wolfgang Goethe-Univ., Frankfurt/Main, Ger.). *Phys. Lett. A* 1978, 68A(1), 87-9 (Eng). The elastic and inelastic scattering of 14.4 keV Moessbauer gamma-rays from the 1/2(311) reflection of RbCaF₃ was investigated in the crit. region. The temp. dependence of both intensities near the phase transition at 193 K is in good agreement with other expts.

Ttz

C.A. 1978. 89 W22

RbCaF₃

12 L841. Влияние доменов на структурный фазовый переход в RbCaF₃. Maetz J., Müllner M., Jex H., Peters K. The influence of domains on the structural phase transition of RbCaF₃. «Solid State Commun.», 1978, 28, № 7, 555—557 (англ.) 1978

T_c

Проведены рентгеновские исследования в области т-р 100—250° К фазового перехода в RbCaF₃ из кубич. фазы с перовскитной решеткой *Pm3m* в тетрагон. фазу *P4₂*. Показано, что т-рная зависимость вращательного тетрагон. смещения описывается выражением $(T_0 - T)^\beta$ с $T_0 = 199^\circ \text{K}$ и $\beta = 0,25$. Разработан метод определения кол-ва доменов как ф-ции т-ры. Обнаружено, что выше T_0 всегда существуют домены. Обсуждено влияние доменов на крит. поведение и параметр порядка.

Г. Л. Апагшиков

ж. 1979, N 12

RbCaF₃

(T_c)

1979
91: 202448s Rubidium-87 nuclear magnetic resonance study of the cubic to tetragonal phase transition in rubidium calcium fluoride. Bhat, S. V.; Mahendroo, P. P.; Rigamonti, A. (Dep. Phys., Texas Christ. Univ., Forth Worth, TX 76129 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1979, 20(5), 1812-16 (Eng). The static and dynamical phenomena occurring around the structural phase transition at $T_c \approx 195.90 \pm 0.15$ K in RbCaF₃ were investigated by ⁸⁷Rb Fourier-transform NMR measurements. The second-order shift of the central line due to the static quadrupole perturbation was related to the elec. field gradient at the Rb site below T_c and the temp. dependence of the angle of rotation (ϕ) of the CaF₆ octahedra was obtained. The ⁸⁷Rb spin-lattice relaxation rate above T_c was related to the rotational fluctuations of the octahedra induced by the crit.-soft-mode branches, from which information on the symmetry and the anisotropy of the fluctuations are derived. Anal. of the results shows: (1) below $T \approx 170$ K the temp. dependence of ϕ is well described by the classical mean-field approxn., with crit. exponent $\beta = 1/2$ and extrapolated transition temp. $T_0 = 220$ K;

C.A. 1979 91 N24

(2) above 100 K nonclassical crit. behavior is evidenced, the apparent crit. exponent being not equal to $1/3$, suggesting a possible changeover in the dimensionality of the correlations of the rotations; (3) the rotational fluctuations appear to be predominantly of R_{23} symmetry but strongly anisotropic, i.e., only slightly correlated in adjacent (100) planes as is consistent with the hypothesis of softening of a large portion of the $R-M$ branch. Order-of-magnitude ests. for the static angle of rotation as well as for the degree of anisotropy of the fluctuations were also obtained and are discussed.

$RbCaF_3$

X-10228

1979

19 Б978. Изучение структурных фазовых методом ядерного магнитного резонанса переходов в $RbCaF_3$. Bhat S. V., Mahendroo P. P. Nuclear magnetic resonance studies of the structural phase transitions in $RbCaF_3$. «Solid State Commun.», 1979, 30, № 3, 129—131 (англ.)

T_c

Методом ЯМР ^{87}Rb (14 МГц, фурье-преобразование) изучен монокрист. образец $RbCaF_3$ при t -рах 130—290 К. При t -рах выше фазового перехода ($T_c=198$ К) в спектре обнаружена одна линия поглощения, к-рая отвечает кубич. симметрии окружения ядра Rb . При $T < T_c$ линия расщепляется на две с отношением интенсивностей 1:2, из к-рых слабоинтенсивная линия обусловлена ядрами Rb , находящимися в доменах с перпендикулярной ориентацией к внешнему полю. Расстояние $\Delta\nu$ между линиями, обусловленное квадратурным возмущением 2-го порядка, измерено в зависимости от t -ры. При $T_c - T/T_c > 1,8 \cdot 10^{-1}$ (ниже 165° К) $\Delta\nu$ линейно изменяется от 0,4 до 0,8 МГц. Это измене-

X-1979/119

ние связано с линейной вариацией параметра порядка η и свидетельствует о применимости теории среднего поля в этой области т-р. При $T > 165$ К угол наклона $\partial\Delta\nu/\partial T$ изменяется, что связано с критич. эффектами. Зависимость $\Delta\nu^{3/2}$ от $T_c - T/T_c$ имеет в этой области линейный характер. Значение крит. индекса составляет $1/2$ для $T < 165$ К и $1/3$ для $T > 165$ К. Полученные результаты хорошо согласуются с данными кристаллографич. и оптич. исследований. С. П. Петросянц

RbCaF₃

T_{tr}

1979

91: 100108p Rubidium-87 NMR study at the cubic to tetragonal phase transition in rubidium calcium fluoride (RbCaF₃). Bulou, A.; Theveneau, H.; Trokner, A.; Papon, P. (Lab. Phys. Etat Condens., Fac. Sci., 72017 Le Mans, Fr.). *J. Phys., Lett. (Orsay, Fr.)* 1979, 40(13), 277-32 (Eng). The ⁸⁷Rb NMR spectrum, in perovskite single crystal of RbCaF₃, was studied above and below the cubic-tt-tetragonal phase transition occurring at 198 K. In the high-temp. cubic phase, the temp. dependence of the resonance line amplitude deviates from the Curie law and this can be attributed to the existence of tetragonal domains. In the low temp. tetragonal phase, a second order quadrupole shift of the central line is obsd., from which the CaF₆ tilt angle (order parameter) is derived. The order parameter temp. dependence is described by a power law with a cross over from exponent 0.5 to exponent 0.32 at 160 K. The tilt angle Φ is compared to the values obtained from x-ray and neutron powder diffraction data.



C.A. 1979, 9, 112

RbCaF₃

1979

(Tr)

V 93:140456y ESR of gadolinium(3+) in distorted sites by charge compensation in AMF₃ crystals. Buzare, J. Y.; Rousseau, J. J.; Fayet, J. C. (Lab. Spectrosc. Solide, Fac. Sci. Mans, 72017 Le Mans, Fr.). *Magn. Reson. Relat. Phenom., Proc. Congr. AMPERE, 20th 1978* (Pub. 1979), 205 (Eng). Edited by Kundla, E.; Lippmaa, E.; Saluvere, T. Springer: Berlin, Fed. Rep. Ger. The spin Hamiltonian parameters of the Gd³⁺-O²⁻ pair in RbCaF₃ are discussed. This pair constitutes an sensitive probe for ESR investigations of the transition which occurs in RbCaF₃ at 193 K.

C.A. 1980, 93, N14

RbCaF₃

T_c

X - 10206a 1979
9 E871. Трикритическое поведение аксиально сжа-
того RbCaF₃. Buzaré J. Y., Fayet J. C., Berlin-
ger W., Müller K. A. Tricritical behavior in uniaxially
stressed RbCaF₃. «Phys. Rev. Lett.», 1979, 42, № 7,
465—468 (англ.)

Методом ЭПР ионов Cd³⁺ (S=7/2), замещающих
ионы Ca²⁺, проведено исследование структурного фазо-
вого перехода $O_h^1 \rightarrow D_{4h}^{18}$ в RbCaF₃ под действием
аксиального давления вдоль направления [100]. Най-
дено, что переход первого рода, происходящий в отсут-
ствие давлений, становится переходом второго рода
при давлении $1,9 \pm 0,3$ кг/мм³ и т-ре $195,3 \pm 0,1^\circ$ К. В этой
трикритич. точке и вплоть до давлений $4,8 \pm 0,3$ мг/мм²
критич. показатель, описывающий температурную зави-
симость угла поворота осей симметрии кристаллич.
поля, равен $0,18 \pm 0,02$. Библ. 18. Б. Е. Вугмейстер

Ф.1949,19

RbCaF₃

фазовый
переход

ор. 1979, N18

X - 10206a

1979

- © 18 Б936. Трикритическое поведение в одноосносжатом RbCaF₃. Buzaré J. Y., Fayet J. C., Berlinger W., Müller K. A. Tricritical behavior in uniaxially stressed RbCaF₃. «Phys. Rev. Lett.», 1979, 42, № 7, 465—468 (англ.)

Методом ЭПР при низких т-рах исследовано влияние одноосных напряжений сжатия на структурный фазовый переход $O_h^1-D_{4h}^{18}$ в монокристаллах RbCaF₃, выращенных по методу Бриджмена — Стокбаргера. Сигнал ЭПР фиксировался от примесной добавки Cd^{3+} ($S=7/2$), замещающей ионы Ca^{2+} . Одноосное напряжение вдоль направления 001 прикладывалось путем сжатия между стальными опорами цилиндрич. образцов, вырезанных из монокристаллов. Обнаружено наличие трикрит. точки при напряжении $1,9 \pm 0,3$ кг/мм² и т-ре $195,3 \pm 0,1$ К, в к-рой порядок фазового перехода изменяется от 1-го рода ко 2-му. От трикрит. точки до напряжения $4,8 \pm 0,3$ кг/мм² крит. индекс β зависит вращательного параметра порядка γ , $\beta = 0,18 \pm 0,02$.

Г. Л. Апарников

RbCaF₃

X-10206a

1949

(90)130928c Tricritical behavior in uniaxially stressed rubidium calcium trifluoride. Buzare, J. Y.; Fayet, J. C.; Berlinger, W.; Mueller, K. A. (Zurich Res. Lab., IBM, Rueschlikon, Switz.). *Phys. Rev. Lett.* 1979, 42(7), 465-8 (Eng). The O_h^1 to D_{4h}^{18} structural phase transition in RbCaF₃ under near-[100] stress (σ) was investigated, by monitoring the electron-paramagnetic resonance lines of Gd³⁺ ($S = 7/2$) on a Ca²⁺ site. The first-order transition at zero stress becomes second order at $\sigma_t = 1.9 \pm 0.3$ kg/mm². The tricritical point is at $\sigma = 4.8 \pm 0.3 \pm 0.1$ K. At this tricrit. point, and up to $\sigma = 4.8 \pm 0.3$ kg/mm², the exponent of the temp. dependence of the rotational order parameter is $\beta = 0.18 \pm 0.02$.

Tr

C. A. 1949, 90, N16

RbCaF₃

1979

Kleemann W, et al.

Physica B+C (Amsterdam)
1979, 97(2-3), 145-55.

(T_{tr})

coll. RbCaF₃-1

KCaCl_3 ; RbCaCl_3 [1112] 10511-X 1919

Midorikawa M., Ishibashi Y., Takagi Y.

J. Phys. Soc. Japan, 1919, 46, n4, 1240.

Optical and dilatometric studies of
 KCaCl_3 and RbCaCl_3 crystals.

PKP 9E870

RbCaF_3

X - 10368

1979

8 Б911. О фазовом переходе в RbCaF_3 . Sakata M., Hidaka M., Storey J. S. A comment on the phase transition in RbCaF_3 . «Solid State Commun.», 1979, 32, № 9, 813—817 (англ.)

(Tr) Путем исследования сверхструктуры методом дифракции нейтронов изучен структурный фазовый переход в RbCaF_3 . Найден один структурный фазовый переход при 4,2 К, связанный с конденсацией мягкой фононной моды R_{25^x} . Угол вращения октаэдров CaF_6 составляет $8,64^\circ$ при 60 К. Представлена тричная зависимость угла вращения.

Резюме

X. 1480 N 8

RbCaF₆

X-10368

1049

(T_{tr})

92: 67872d A comment on the phase transition in rubidium calcium trifluoride. Sakata, M.; Hidaka, M.; Storey, J. S. (Mater. Phys. Div., AERE, Harwell/Oxon., Engl. OX11 0RA). *Solid State Commun.* 1979, 32(9), 813-17 (Eng). The structural phase transition in RbCaF₆ was studied by observing superlattice points by means of neutron diffraction. There is one structural phase transition with the R_{2g} soft mode phonon condensation up to 4.2 K. The rotation angle of CaF₆ octahedra, ϕ , is 8.64 degrees at 60 K. The temp. dependence of ϕ is also given.

Q. A. 1980. 92, 108

$RbCaF_3$

X-10203

1980

① 18 Б938. Исследование структурного фазового превращения во фторперовските $RbCaF_3$ методом ЯМР. Alain Bulou, Hélène Theveneau, Arlette Trokner, Pierre Papon. Study of the structural phase transition of the fluoroperovskite $RbCaF_3$ by NMR techniques. «Ferroelectrics», 1980, 26, № 1—4, 643—646 (англ.)

T_c

С помощью ЯМР ^{87}Rb изучен переход из кубич. в тетрагон. фазу при 198 К в $RbCaF_3$ (I). Измерения проводились на кристалле I, имеющем форму параллелепипеда $7,25 \times 6,04 \times 5,45$ мм³ с плоскостями, параллельными (100), (011) и (011). В тетрагон. фазе тетраэдры CaF_6 имеют угол наклона ϕ , к-рый м. б. определен из.

X 1980 n 18

константы ν квадрупольного взаимодействия. Представлена зависимость ν от T -ры в тетрагон. фазе I. Найдено, что при $T < 150$ К $\nu \propto (T_c' - T)^{0,5}$ где $T_c \sim 230$ К, при $T > 150$ К $\nu \propto (T_c - T)^{0,32}$, где $T_c = 198 \pm 0,5$ К. Т. о. указанная зависимость описывается степенным законом с переходом от крит. индекса Ландау к крист. индексу $\beta = 0,32$. В кубич. фазе I при приближении к T_c обнаружено аномальное уменьшение интенсивности ЯМР сигнала. Установлено, что интенсивность ЯМР сигнала отклоняется от закона Кюри на 20 К выше T_c . Высказано предположение, что аномальное поведение в кубич. фазе вблизи T_c обусловлено появлением тетрагон. доменов.

В. И. Фарафонов

RbCaF₃

V92: 86154n The temperature dependence of the structures of rubidium calcium fluoride (RbCaF₃), and the determination of the low temperature phases. Bulou, A.; Ridou, C.; Rousseau, M.; Nouet, J.; Hewat, A. W. (Univ. Phys. Etat Condense, Fac. Sci., 72017 Le Mans, Fr.). *J. Phys. (Orsay, Fr.)* 1980, 41(1), 87-96 (Eng). The temp. dependence of the structural parameters in the vicinity of the cubic to tetragonal

1980

Ttr

structural phase transition of RbCaF₃ at 193 K is reported together with the structure of this compd. below 50 K. The neutron powder profile refinement method was used to carry out this study. Space group *Pnma* was found at 20 and 4.5 K. Equality of the CaF₆ tilt angles about each of the three $\langle 100 \rangle$ cubic axes in the low-temp. phase and the behavior of the temp. factors in the cubic and tetragonal phases indicate an order-disorder character of the 193 and 50 K phase transitions.

CA 1980 92 N10

RbCaF₃

1980

(T_{tr})

93: 105024j Study of the structural phase transition of the fluoroperovskite calcium rubidium fluoride by NMR techniques. Bulou, Alain; Theveneau, Helene; Trokiner, Arlette; Papon, Pierre (Lab. Phys., Fac. Sci., 72017 Le Mans, Fr.). *Ferroelectrics* 1980, 26(1-4, Proc. Fourth Eur. Meet. Ferroelectr., Part 3), 643-6 (Eng). The cubic to tetragonal phase transition at 198 K in RbCaF₃ was studied by ⁸⁷Rb NMR spectroscopy. The CaF₆ octahedral tilt angle in the tetragonal phase was detd. from the quadrupolar coupling const. and its temp. dependence described by a power law which changes from a Landau type exponent to an exponent $\beta = 0.32$ at 150 K. In the cubic phase, deviation of the Larmor frequency from a Curie law 20° above the Curie temp. was attributed to the existence of tetragonal domains.

C. A. 1980, 93 N10

$RbCaF_3$

1980

фазовый
переход

9 E794. Исследование структурного фазового перехода во фторперовските $RbCaF_3$ методом ЯМР. Study of the structural phase transition of the fluoroperovskite $RbCaF_3$ by NMR techniques. Bulou Alain, Theveneau Hélène, Trokiner Arlette, Papou Pierre. — Fourth European Meeting on Ferroelectricity, Portoroz, 3—7 Sept., 1979. — «Ferroelectrics», 1980, 26, № 1—4, 643—646 (англ.)

На монокристалле $RbCaF_3$ исследована температурная зависимость сигналов ЯМР от ядер ^{87}Rb вблизи т-ры тетрагонально-кубич. кубич. перехода. По значениям константы квадрупольного спаривания найден угол ϕ наклона октаэдров CaF_6 к тетраг. оси, определяющей степень упорядочения структуры. Установлен характер степенного закона изменения ϕ с т-рой в кубич. и тетраг. фазах. Показана возможность существования доменов тетраг. фазы в кубич. матрице. Б. Г. Алапин

ϕ . 1980 № 9

RbCaF₃

1980

Buzare J. V. et al

Ferroelectrics, 1980, 26,
N 1-4, 647-50

T_{tr}



Cu RbCdF₃ ; I

RbCaF₃

1980

RbCdF₃

(Fr)

(+1) []

Ф. 1980
N 9

9 E797. Исследование структурных фазовых переходов методом ЭПР на парамагнитных центрах Gd³⁺ в соединениях AMF₃. E. P. R. Measurements on paramagnetic Gd³⁺ centres for structural phase change investigations in AMF₃ compounds. Buzare J. Y., Fayet-Bonnell M., Fayet J. C. — Fourth European Meeting on Ferroelectricity, Portoroz, 3—7 Sept., 1979. — «Ferroelectrics», 1980, 26, № 1—4, 647—650 (англ.)

Сообщается об измерении вращательного параметра порядка структурного фазового перехода (СФП) $O_h^1 \rightarrow D_{4h}^{18}$ в RbCaF₃ ($T_c = 193^\circ \text{K}$) и RbCdF₃ ($T_c = 124^\circ \text{K}$) с использованием различных парамагнитных Cd³⁺ центров. В частности, использованы: 1) ионы Gd³⁺, замещающие Cd²⁺ или Cd²⁺ в позициях с кубич. симметрией выше T_c , 2) пара Gd³⁺—O²⁻ в RbCaF₃ и 3) тетрагональный Gd³⁺ центр с компенсированным зарядом в RbCdF₃. Образцы представляли собой тонкие пластинки, выре-

занные вдоль $[001]$, магн. поле вращалось в плоскости (001) . Приводятся значения Φ , полученные с помощью:
а) квадрупольного члена спинового гамильтониана и
б) поворота главных осей гамильтониана. Отмечается простота и точность измерений в случае б) в сравнении с дифракционными методами. Величина локального скачка при изменении параметра порядка зависит от позиционной симметрии парамагн. иона. Подобная зависимость должна отсутствовать при измерении трикритич. индекса β_T в кристалле RbCaF_3 , подвергнутом одноосному сжатию, т. к. в этих условиях СФП первого рода становится переходом второго рода, а все полученные локальные значения связаны между собой линейно.

И. О. Майер

RbCaF_3

X-10283

1980

18 B906. Исследование фазового перехода кубический — тетрагональный в RbCaF_3 с помощью дифракции нейтронов, рентгеновских лучей и γ -лучей от мессбауэровского источника. Jex H., Maetz J., Müller M. Cubic-to-tetragonal phase transition in RbCaF_3 investigated by diffraction experiments with neutrons, x rays, and γ rays from a Mössbauer source. «Phys. Rev.», 1980, B21, № 3, 1209—1218 (англ.)

(T_{tr})

С помощью 3 видов дифракции: нейтронов, рентгеновских и γ -лучей исследован структурный фазовый переход из кубич. модификации ($Pm3m$) в тетрагон. ($I4/mcm$), происходящий в RbCaF_3 при $T_0=198$ К. Нейтронографич. исследования на порошковых образцах показали, что длина связи Ca—F проходит через минимум при T_0 . Определены параметры решетки в интервале 50—300 К. Величина флуктуаций параметра порядка



X 1980 n 18

сопоставима со значениями параметра порядка φ в крит. области ниже T_0 . Крит. поведение φ описывается уравнением $\varphi = \varphi_0(T_0 - T)^\beta$ с $\beta = 0,25(1)$ $\varphi = 2,24(3)$ и $T_0 = 197(1)$. из данных по рентгеновской дифракции на монокристаллах $\beta = 0,25(1)$, $\varphi = 2,47(2)^\circ$, $T_0 = 199(1)$ К. Изучено распределение доменов в монокристалле и их изменение объема с т-рой. С помощью дифракции γ -лучей выделены упругие и неупругие части рефлекса $1/2(311)_{\text{куб}}$ и центрального пика. Г. Л. Апарников

RbCaF₃

(T_{t2})

X - 10283

1980

92: 138939u Cubic-to-tetragonal phase transition in rubidium calcium fluoride investigated by diffraction experiments with neutrons, x-rays, and γ -rays from a Moessbauer source. Jex, H.; Maetz, J.; Muellner, M. (Inst. Kernphys., J. W. Goethe - Univ., D-6000 Frankfurt, Fed. Rep. Ger.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1980, 21(3), 1209-18 (Engl). The cubic-to-tetragonal phase transition of RbCaF₃ at $T_0 = 198$ K was studied on single crystals and powder samples. From x-ray expts., the temp. dependence of the domain distribution was detd. In particular an anisotropic distribution of domains was found just above T_0 . The crit. exponent β , free from the influence of domains, is 0.25(1). The bond lengths of the Ca F bond exhibit a pronounced min. at the transition. The fluctuations of the order parameter ($\langle \varphi^2 \rangle - \langle \varphi \rangle^2$)^{0.5} are compared with $\langle \varphi \rangle$ to det. the crit. region below T_0 . A peak in $\langle \varphi^2 \rangle$ is found in the neutron expts. Elastic and inelastic scattering components from the central peak above T_0 and from the superlattice point $1/2(311)_{\text{cubic}}$ below T_0 were sepd. by Moessbauer expt. with an energy resolu. of 60 neV.

C.A. 1980.92 N16

RbCaF_3

X - 10283

1980

фазовый
переход

10 E784. Исследование фазового перехода из кубической в тетрагональную фазу в RbCaF_3 методами дифракции нейтронов, рентгеновских лучей и γ -лучей от мессбауэровского источника. Cubic-to-tetragonal phase transition in RbCaF_3 investigated by diffraction experiments with neutrons, X-rays, and γ rays from a Mössbauer source. Jex H., Maetz J., Müllner M. «Phys. Rev.», 1980, В 21, № 3, 1209—1218 (англ.)

Методом дифракции трех типов излучения изучены некоторые новые аспекты перехода из кубической в тетраг. фазу RbCaF_3 ($T_0=198^\circ\text{K}$). Дифракция нейтронов на порошковых образцах RbCaF_3 дала возможность: 1) исследовать структурные параметры в условиях отсутствия доменов и получить критич. индекс $\beta=0,25$; 2) определить наличие минимума длин связей $\text{Ca}-\text{F}$ в точке перехода, что косвенным образом демонстрирует деформацию электронных оболочек; 3) путем сравнения флуктуаций параметра порядка ($\langle\varphi^2\rangle-\langle\varphi\rangle^2$)

Ф. 1980 № 10

с $\langle \varphi \rangle$ определить ширину критической температурной области ниже T_0 ; 4) впервые обнаружить пик фактора Дебая — Валлера атомов фтора, существование которого может быть отнесено к усилению флуктуаций вблизи точки перехода. Из данных по рассеянию рентгеновских лучей на монокристалле RbCaF_3 определена температурная зависимость распределения величин доменов. В частности, обнаружено анизотропное распределение доменов в температурной области, непосредственно прилегающей к T_0 сверху. Мессбауэровская дифракция ^{57}Co γ -лучей использована для разделения упругих и неупругих вкладов от центрального пика выше T_0 и от суперрешеточного отражения $1/2(311)_{\text{куб}}$ ниже T_0 .

RbCaF₃

1980

(Tr)

19 Б898. Сдвиг под действием гидростатического давления фазового перехода первого рода в RbCaF₃. Müller K. A., Berlinger W., Buzaré J. Y., Fayet J. C. Shift of the first-order transition in RbCaF₃ under hydrostatic pressure. «Phys. Rev.», 1980, В 21, № 5, 1763—1765 (англ.)

В диапазоне гидростатич. давл. до 1,2 кбар методом ЭПР на примесных ионах $Gd^{3+}=7/2$, находящихся в узлах Ca^{2+} , исследован структурный фазовый переход 1-го рода из кубич. фазы O_h^1 в тетрагон. D_{4h}^{18} , происходящий при $T_c=193$ К и атм. давл. в RbCuF₃. Показано, что зависимость T_c от давл. носит линейный характер во всем исследованном диапазоне. Наклон линии равновесия составляет $3,6 \pm 0,1$ град/кбар. Результаты проведенных исследований сопоставлены с данными, полученными при одноосном сжатии вдоль оси [100], в соответствии с к-рыми $\partial T_c / \partial P_{[100]} = 12$ град/кбар. Обсуждена возможность и тип трикрит. поведения.

Г. Л. Апарников

Х. 1980 № 19

RbCaF₃

1980

Tr

93: 85697a Phenomenological description of the first-order 'improper ferroelastic phase transition in calcium rubidium trifluoride at 195 K. Ridou, C.; Rousseau, M.; Nouet, J. (Lab. Phys. Etat Cond., Fac. Sci., 72017 Le Mans, Fr.). *Ferroelectrics* 1980, 26(1-4, Proc. Fourth Eur. Meet. Ferroelectr., Part 3), 685-8 (Eng). The weak 1st-order ferroelastic phase transition in RbCaF₃ at 194 K was characterized by calcg. the temp. dependence of the spontaneous strain, the sp. heat, and the elastic const. The calcns. were performed using a phenomenol. Hamiltonian which included, in addn. to the expression proposed by J. C. Slonczewski and H. Thomas (1970), the 6th-order terms in the order parameter.

CA 1980 22 18

RbCaF₃

X-10346

1980

17 Б991. Феноменологическое описание несобственного сегнетоэластического фазового перехода первого рода в RbCaF₃ при 194 К. Ridou C., Rousseau M., Nouet J. Phenomenological description of the first order improper ferroelastic phase transition in RbCaF₃ at 194 К. «Ferroelectrics», 1980, 26, № 1—4, 685—688 (англ.)

Tt₂

Для описания слабого перехода 1-го рода кубич.-тетрагон. при 194 К в несобственном сегнетоэластике RbCaF₃ предложен феноменологич. гамильтониан, содержащий в разложении свободной энергии по параметру порядка помимо семи членов, соотв.-щих теории Ландау для точечной группы *m3m* и моды *R₂₅* в кубич. фазе, 6 добавочных членов, описывающих деформационные взаимодействия. Показано, что предложенная модель хорошо описывает т-рную зависимость параметров решетки, уд. теплоемкости и упругих постоянных, а также дает качеств. описание аномалий, наблюдаемых вблизи фазового перехода.

Г. Л. Апарников

X-1980 N 17

RbCaF₃

1980

X - 10 348

фазовый
переход

9 E793. Феменологическое описание несобственного перехода первого рода в сегнетоэластическую фазу в RbCaF₃ при 194° K. Phenomenological description of the first order improper ferroelastic phase transition in RbCaF₃ at 194 K. Ridou C., Rousseau M., Nouet J. — Fourth European Meeting on Ferroelectricity, Portoroz, 3—7 Sept., 1979. — «Ferroelectrics», 1980, 26, № 1—4, 685—688 (англ.)

В рамках теории фазовых переходов Ландау проведен феменологич. анализ фазового перехода в RbCaF₃. В выражении для свободной энергии учтены члены шестого порядка по параметру упорядочения и члены, описывающие взаимодействие колебаний мягкой моды с упругими деформациями. Вычисленные температурные зависимости параметров решетки, теплоемкости, упругих констант качественно совпадают с экспериментальными литературными данными. Библ. 14.

И. Д.

Ф. 1980 N 9

RbCaF₃

1981

3 E549. Теоретическое исследование структурного фазового перехода в RbCaF₃. Theoretical study of the structural phase transition in RbCaF₃. Boyer L. L., Hardy J. R. «Phys. Rev. B: Condens. Matter.», 1981, 24, № 5, 2577—2591 (англ.)

T_{tr}

Предпринимается попытка построения теории структурного фазового перехода в RbCaF₃ при $T_c = 193$ К из первых принципов. Используемый подход включает в себя в качестве существенных моментов конструирование не зависящего от произвольных параметров меж-ионного потенциала с помощью метода Гордона — Кима и учет ангармонич. эффектов в рамках квазигармонич. приближения для свободной энергии, расширенного на случай мнимых частот. Метод Гордона — Кима основан на предположении, что распределение зарядов ионов не изменяется при их объединении в единую систему. При T -рах ниже ~ 1280 К квазигармонич. частоты колебаний CaF₆ октаэдров становятся мнимыми за

ф. 1982, 18, №3

счет теплового сокращения решетки. Статич. энергия решетки как ф-ция вращений CaF_6 имеет двойной минимум. До т-р ≤ 125 К октаэдры находятся в метастабильном равновесии. Это обстоятельство проявляется в отсутствии минимума у свободной энергии, отвечающего конечным вращениям октаэдров выше 125 К. Предложено объяснение тенденции к повышению т-р переходов, обусловленных граничными нестабильностями, при приложении гидростатич. давления. Библ. 26.
И. О. Майер

RbCaF₃

1981

6 Б911. Теоретическое исследование структурного фазового перехода в RbCaF₃. Hardy J. R., Boyer L. L. Theoretical study of the structural phase transition in RbCaF₃. «Phys. Rev. B: Condens. Matter.», 1981, 24, № 5, 2577—2591 (англ.)

T_{tr} ;

Проведено квантово-мех. исследование структурного фазового перехода при т. крит. $T_c = 193$ К в RbCaF₃ на основе межзонных Пт, выведенных из теории Гордон—Кима, а также развито новое квазигармонич. приближение для свободной энергии (F). Показано, что переход вызван неустойчивостью трижды вырожденного R -точечного колебания, приводящего к координац. повороту октаэдра CaF₆. Обнаружено, что при сжатии квазигармонич. частота R -точечных колебаний становится мнимой около 1280 К. Ниже этой т-ры статич. энергия решетки, как функция вращений CaF₆, имеет двойной минимум. Квазигармонич. F не имеет минимума

X. 1982, 19, № 6.

для конечных вращений вплоть до $T \leq 125$ К, т. е. теор. значение T_c равно 125 К. В тетрагон. фазе вычисленное отношение c/a и угол поворота октаэдра CaF_6 , минимизирующий статич. F , хорошо согласуется с эксперим. данными при низкой т-ре. Предложено рассматривать структурный переход как следствие «незамерзающих» дисторций, связанных с низкосимметричной фазой. Объяснено повышение нестабильностей T_c на границах зон при гидростатич. сжатии. С. К. Карепанов

$\text{CaCl}_2 - \text{RbCl}$

1981

$\text{CaBr}_2 - \text{RbBr}$

$\text{CaF}_2 - \text{RbF}$

K_p ;

(17)
(12)

Б848. Масс-спектрометрическое исследование паров бинарных расплавленных смесей галогенид щелочно-земельного металла — галогенид щелочного металла. Emons H.-H., Kießling D., Hortbeck W. Mass spectrometrical investigations of vapors of binary molten mixtures alkaline earth halide—alkali halide. «4th Conf. Soc. Countries Molten Salt Chem. and Electrochem., Balatonfüred, Oct. 5—8, 1981. Ext. Abstr.» S. 1, / s. a., 19—21 (англ.)

Масс-спектрометрическим методом получены зависимости $K_D = -A + B/T$ для процессов димеризации галогенидов щел. металлов MX , где $\text{M} = \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$. Т-рный интервал не указан. Для галогенидов щел.-зем. металлов с использованием одних и тех же величин $\Delta S^0 = 134$ Дж/К·моль и $\Delta C_p = 8,4$ Дж/К·моль по III закону термодинамики получены энтальпии димеризации $\Delta H^0_{D, 298}$. Исследованы: CaCl_2 , SrCl_2 , BaCl_2 , CaBr_2 , SrBr_2 , BaBr_2 , CaI_2 , SrI_2 . Установлено, что кол-во

X. 1982, 19, N 7.

с. 11: 40

$\text{CaCl}_2 - \text{CsCl}$
и т.д.

димеров в паре мало. Оно колеблется от 0,2% у BaBr_2 до 1,9% у CaBr_2 . Изучен состав пара над расплавленными смесями галогенидов щел.-зем. металлов и галогенидов щел. металлов: $\text{CaCl}_2 - \text{RbCl}$, $\text{CaCl}_2 - \text{CsCl}$, $\text{SrCl}_2 - \text{KCl}$, $\text{BaCl}_2 - \text{KCl}$, $\text{CaBr}_2 - \text{RbBr}$, $\text{CaBr}_2 - \text{CsBr}$, $\text{SrBr}_2 - \text{RbBr}$, $\text{SrBr}_2 - \text{CsBr}$, $\text{BaBr}_2 - \text{RbBr}$, $\text{BaBr}_2 - \text{CsBr}$, $\text{CaJ}_2 - \text{NaJ}$, $\text{CaJ}_2 - \text{KJ}$, $\text{CaJ}_2 - \text{RbJ}$. Основными компонентами пара являются мономерные и димерные молекулы галогенидов щел. металлов. Кроме них присутствовали гетерокомплексы 1:1, 1:2, 2:1, концентрация к-рых составляла максимум несколько процентов.

И. В. Сидорова

ание
вес

CsCl

RbCaF₃

1981

T_{tr};

9 B813. Критическое рассеяние нейтронов вблизи фазового перехода при 50 К в RbCaF₃. Ridou C., Rousseau M., Bouillot J. Critical neutron scattering near the 50 K phase transition in RbCaF₃. The Fifth International Meeting on Ferroelectricity, IMF-5, Pa state Univ., 17—21 Aug., 1981. «Ferroelectrics», 1981, 36, № 1—4, 463—365 (англ.)

Методом изучения спектров неупругого рассеяния нейтронов подтверждено существование фазового перехода в RbCaF₃ при 50 К. Приводится т-рная зависимость крит. рассеяния, наблюдаемого в точке М псевдокубич. зоны Бриллюэна. Эта зависимость обсуждается в рамках теории фазовых переходов типа порядок — беспорядок.

Резюме

X, 1982, 19, N 9.

RbCaF₃

1981

T_c ;

9 Б827. Исследование флуктуаций в RbCaF₃ около $T_c=195$ К методом ЭПР. Simon P., Buzare J. Y., Rousseau J. J., Leble A., Fayet J. C. E.P.R. Studies of fluctuations in RbCaF₃ near $T_c=195$ K. The Fifth International Meeting on Ferroelectricity, IMF-5, Pa state Univ., 17—21 Aug., 1981. «Ferroelectrics», 1981, 36, № 1—4, 451—454 (англ.)

Методом ЭПР исследован антисегнетоэластический фазовый переход в RbCaF₃ из кубич. в тетрагон. модификацию, происходящий при $T_c=195$ К. Обнаружена область сосуществования двух фаз в т-рном интервале $T_c + 1,8$ К. В интервале $T_c + 3$ К происходит переход от лоренцевской к гауссовой форме линий.

Г. Л. Апарников

X. 1982, 19, N 9.

RbCaF₃

1982

1 6 E737. Распределение доменов при двуосном нагружении ниже точки фазового перехода из кубической фазы в тетрагональную в RbCaF₃. Domain distribution below the cubic-to-tetragonal phase transition in RbCaF₃ under biaxial stress. Jex H., Müllner M., Tietze H., Lehner N., Wilson S. «Phys. Rev. B: Condens. Matter», 1982, 26, № 5, 2539—2546 (англ.)

T₀

Нейтроннографическим методом определялась относительная доля доменов разной ориентации тетраг. фазы, образующейся из кубич. фазы в RbCaF₃. В отсутствие внешней нагрузки ниже т-ры фазового перехода $T_0 \approx 190^\circ \text{C}$ образуются равные кол-ва ($\approx 33\%$) доменов всех трех возможных доменов тетраг. фазы, отвечающих трем возможным направлениям оси тетрагональности относительно кубич. осей исходной фазы. С понижением т-ры доля доменов одного типа растет и достигает насыщения ($\approx 66\%$), а доля других падает до 29% и $\approx 5\%$. Двуосное напряженное состояние, создаваемое сжатием образца в камере при давлении 11,8 бар, при-

ф. 1983, 18, № 6

водит к существенному увеличению относит. доли одного типа доменов — до 91%, т. е. к почти полной монодоменизации образца. Увеличение доли доменов от $\approx 33\%$ при T_0 до предельной происходит в узкой области т-р ниже T_0 (≈ 15 K). Обнаружен также под нагрузкой «доменный предвестник» выше T_0 : увеличиваются интенсивности рефлексов $(\bar{1}\bar{1}\bar{3})$ и $(\bar{1}\bar{3}\bar{1})$ при постоянной интенсивности $(\bar{3}\bar{1}\bar{1})$. Это свидетельствует о тенденции к проявлению доменов, наиболее выгодных при заданной нагрузке. Библ. 24. Д. Т.

RbCaF₃

1982

Д) 12 E439. Тепловое расширение решетки фторида рубидия кальция. Lattice thermal expansion of rubidium calcium fluoride. Reddy K. Damodar, Kistiah P., Venudhar Y. C., Murthy K. Satyanarayana, Iyengar Leela. «J. Mater. Sci. Lett.», 1982, 1, № 6, 241—243 (англ.)

тепловое
расширен.

Тепловое расширение RbCaF₃, обладающего диэлектрич. свойствами, исследовано в интервале 28—496°С методом порошковой дифрактометрии по восьми отражениям. Изменение параметров элементарной ячейки с ростом t -ры имеет нелинейный характер. Среднее значение коэф. теплового расширения для данного интервала t -ры равно $17,21 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. А. П. Рыженков

Ф. 1982, 18, N 12.

RbCaF₃

1982

24 Б456. Термическое расширение решетки фторида рубидия и кальция. Reddy K. Damodar, Kistiah P., Venudhar Y. C., Murthy K. Satyanarayana, Yengar Leela. Lattice thermal expansion of rubidium calcium fluoride. «J. Mater. Sci. Lett.», 1982, 1, № 6, 241—243 (англ.)

термическое
расширение.

Рентгенографически (метод порошка, высокотемпературная съемка) прослежен характер расширения кубич. решетки RbCaF₃ при нагревании в интервале t -р 28—496°. Параметр решетки a : при 28° 0,44559 нм, при 496° 0,44908. Зависимость коэф. линейного расширения от t -ры выражается уравнением: $\alpha_T = [11,8553 + 3,0103 \times 10^{-2}T - 8,9125 \times 10^{-5}T^2 + 1,7480 \times 10^{-7}T^3] \times 10^{-6}$. Средн. коэф. термич. расширения α равен $17,21 \times 10^{-6}$. Зависимость параметра решетки a от t -ры носит нелинейный характер.

С. В. Соболева

Х. 1982, 19, № 24.

RbCaF₃

1982

11 E232. Динамика решетки и фактор Дебая—Валлера RbCaF₃ при температурах, близких к температуре фазового перехода 195 К. Lattice dynamics and Debye—Waller factor near the 195 K phase transition in RbCaF₃. Rousseau M., Ridou C., Bulou A. «Solid State Commun.», 1982, 41, № 12, 951—953 (англ.)

T_i ;

Экспериментальные температурные зависимости средне-квадратичных амплитуд (СКА) атомов в RbCaF₃ сравниваются с теоретическими. Расчет СКА производится с использованием гармонического и квазигармонич. приближений. В последнем случае учитывается, зависящая от T -ры перенормировка мягких мод. Экспериментальные и теоретич. значения СКА ионов Rb и Ca изотропны и зависят от T -ры в соответствии с гармонич. теорией. СКА для ионов F анизотропны, и те их компоненты, которые связаны с мягкими модами плохо описываются обоими использованными моделями даже при $T \gg T_c$. Делается вывод о сильной ангармоничности колебаний ионов F в кубич. фазе.

В. С. Виноградов

ф 1982, 18, № 11.

RbBr/CaBr₂

1982

газовое

газопер-
ма

Seifert H. J., Haber-
kauer D.

Z. Anorg. Allg. Chem.
1982, 491, 301-307.

(ср. CsBr/CaBr₂; I)

RbCaF₃

1982

7 Б680. Динамические кластеры и разупорядочение в RbCaF₃ вблизи и выше $T_c=195$ К. Dynamic clusters and disorder in RbCaF₃ near and above $T_c=195$ К. Simon P., Rousseau J. J., Buzaré J. Y. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1982, 15, № 28, 5741—5750 (англ.)

T_c ;

При T -рах 100—300 К в X-диапазоне изучены спектры ЭПР однодоменных кристаллов RbCaF₃, содержащих парамагн. центры $Gd^{3+}-O^{2-}$, замещающие пары ионов $Ca^{2+}-F^-$. Установлено, что вблизи точки перехода из кубич. фазы в тетрагон. ($T_c=195$ К) наблюдается уширение и изменение формы линии ЭПР парамагн. центров. Полученные результаты свидетельствуют о наличии крит. статич. флуктуаций в тетрагон. фазе, появлении упорядоченных кластеров в области $T_c-(T_c+2$ К) и их разупорядочении в высокотемпературной фазе. Эксперим. результаты находятся в разумном согласии с предсказаниями теории. Ю. В. Ракитин

X. 1983, 19, № 7

RbCaF₃

1982

T_c;

98: 25774s Dynamic clusters and disorder in rubidium calcium trifluoride near and above $T_c = 195$ K. Simon, P.; Rousseau, J. J.; Buzare, J. Y. (Lab. Spectrosc. Solide, Fac. Sci. Mans, 72017 Le Mans, Fr.). *J. Phys. C* 1982, 15(28), 5741-50 (Eng). The cubic to tetragonal phase transition ($T_c = 195$ K) was investigated in RbCaF₃ by monitoring the EPR lines of Gd³⁺-O²⁻ substituted to a Ca²⁺-F-bond at 100-380 K. From the broadening and the shape change of the lines, there was evidence for crit. static fluctuations in the tetragonal phase, precursor order clusters in the $T_c-(T_c + 2$ K) range and a disordered high-temp. phase. The results agree well with recent predictions and models.

C. A. 1983, 98, N4.

RbCaF₃

1982

3 E809. Динамические кластеры и разупорядочение в RbCaF₃ в окрестности и выше $T_c = 195$ К. Dynamic clusters and disorder in RbCaF₃ near and above $T_c = 195$ К. Simon P., Rousseau J. J., Buzaré J. Y. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1982, 15, № 28, 5741—5750 (англ.)

T_{tr} ;

Измерены линии ЭПР пар $Gd^{3+}-O^{2-}$ -замещающих связи $Ca^{2+}-F^-$ в RbCaF₃, в интервале т-р от 100 до 380 К. При $T_c = 195$ К RbCaF₃ испытывает переход из кубической в тетраг. фазу. Ниже T_c в спектре имеется две линии, обусловленные поворотами пары $Gd^{3+}-O^{2-}$ на углы $\pm\varphi$. Непосредственно выше T_c возникает дополнительная узкая центральная линия, соответствующая ориентации пар вдоль оси четвертого порядка. В интервале $T_c-[T_c+2]$ К все три линии сосуществуют. Такая картина объясняется наличием в системе двух временных масштабов — критического, связанного с появлением и эволюцией кластеров низкотемператур-

фр. 1983, 18, №3

ной фазы при приближении к T_c сверху, и не критического, связанного с квазигармонич. колебаниями ионов F^- в кластерах. При этом нарушенная локальная симметрия исключает обращение частоты мягкой моды в нуль. Под влиянием динамических ангармонич. эффектов в системе происходит смена режима смещения режимом перехода порядок — беспорядок. Существование смены режимов перехода подтверждается ренормгрупповыми расчетами и исследованиями методом молекулярной динамики. Библ. 32. И. О. Майер

Rb₂CaI₄(2) [orm. 18300] 1983

Emmons H.-H., Morlbeck W.,
et al.,

$\Delta_f H;$

Z. anorg. und allg. Chem.,
1983, 507, N12, 142-148.

Rb₂CaBr₄(2) lorn. 18300 1983

Emmons H.-H., Morlbeck W.,
et al.,

$\Delta_f H;$

Z. anorg. und allg. Chem.,
1983, 507, N12, 142-148.

Rb Ca $\gamma_3(2)$

10m. 18300/

1983

$\Delta_f H;$

Emmons H.-H., Morlbeck W.,
et al.,

Z. Anorg. und allg. Chem.,
1983, 507, N12, 142-148.

RbLa Br₃(2) [om. 18300] 1983

Emors H.-H., Morlbeck W.,
et al.,

$\Delta_f H^\circ$

Z. anorg. und allg. Chem.,
1983, 507, N12, 142-148.

RbLaCl₃(2) 10m. 18300 1983

Emons H.-H., Morlbeck W.,
et al.,

4H;
Z. anorg. und allg. Chem.,
1983, 507, N12, 142-148.

Rb₂CaCl₄(2) [om. 18300] 1983

Emors H.-H., Morlbeck W.,
et al.,

$\Delta_f H^\circ$

Z. anorg. und allg. Chem.,
1983, 507, N12, 142-148.



RbCaF₃

1983

19 B3166. Экспериментальные результаты исследования ангармоничности во фторсодержащих перовскитах. Experimental results about the anharmonicity in fluoerovskites. Ridou C., Rousseau M., Gesland J. Y., Bouillot J., Vettier C. «Ferroelectrics», 1984, 55, № 1—4: Proc. 5th Eur. Meet. Ferroelectr. (EMF—5), Benalmádena, Malaga, Sept. 26—30, 1983. Pt3, 959—962 (англ.)

В диапазоне давл. до 4 кбар и т-р от 4,2 до 300 К методом нейтронографии исследованы т-рные зависимости частот мягкой моды R_{25} на монокристаллах RbCaF₃ (I), KZnF₃ (II) и CsCaF₃ (III), выращенных по методу Бриджмена. Целью исследования явилось выяснение вклада двух составляющих частот мягкой моды R_{25} (1-я составляющая — вследствие термич. расширения, к-рое изменяет гармонич. частоты мод путем изменения расстояния между модами, и 2-я составляющая — вследствие собственной энергии нормальных мод при взаимодействиях с др. нормальными модами). Сравнение результатов для I, испытывающего в данном интервале т-р фазовый переход, с результатами для II и III, где переходы отсутствуют, показывает, что сдвиг

Т_т, ангармон.

17(42)

х. 1984, 19, N 19

мягкой моды во фторсодержащих перовскитах определяется гл. обр. вкладом изменения собственной энергии моды.

В. А. Ступников



$RbCl \cdot nCaCl_2$

1984

$RbF \cdot nCaF_2$ Bandyopadhyay S,
(mb. p-pb1) Deb S. K.

$\Delta_f H$; Phys. Status Solidi
B 1984, 124 (2), 545-57.

(ex. $\bullet$ $NaCl \cdot nCaCl_2$; I)

RbCaF₃

1984

10 E668. Изучение методом ЭПР локальных флуктуаций в RbCaF₃ выше и ниже T_c . Local fluctuations in RbCaF₃ above and below T_c studied by E. P. R. Buzare J. Y., Simon P. «Ferroelectrics», 1984, 54, № 1—4: Proc. 5 Eur. Meet., Ferroelectr. (EMF-5), Benalmádena, Malaga, Sept. 26—30, 1983. Pt 2, 455—458 (англ.)

Изучен спектр ЭПР примеси $Gd^{3+}-O^{2-}$ в RbCaF₃. Показано, что при $T \rightarrow T_c$ (т-ра структурного превращения из кубической в тетраг. фазу) имеется промеж. поведение (кроссовер), характерное для переходов типа порядок—беспорядок и типа смещения. Температурная зависимость параметров центр. пика указывает на наличие предпереходных эффектов в области т-р до $T_c + 50$ K, а также некоторой остаточной неупорядоченности вдоль тетраг. оси при $T < T_c$. Е. И. Кац

T_c

фр. 1984, 18, N 10

RbCaF₃

1984

12 E688. Динамика и разупорядочение структуры RbCaF₃ выше и ниже фазового перехода при $T_c = 195$ K. Dynamics and disorder in RbCaF₃ above and below $T_c = 195$ K. Buzaré J. Y., Simon R. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1984, 17, № 15, 2681—2688 (англ.).

Фазовый переход 1-го рода $O_h^1 - D_{4h}^{18}$ в RbCaF₃ исследован методом ЭПР путем детального изучения особенностей поведения резонансных линий активных центров $Gd^{3+} - O^{2-}$, образующихся при замещении связанных ионов $Ca^{2+} - F^-$. Как выше, так и ниже T_c температурные зависимости ширины и положения линий ЭПР интерпретируются в модели Руссо, учитывающей прецессию октаэдрич. комплексов CaF_6 относительно различных особей 4-го порядка кубич. фазы. Экспериментально доказано, что выше T_c имеет место двумер-

T_c ,

ф. 1984, 18, N 2

ная корреляция смещений октаэдров, существование которой ранее постулировалось при объяснении первого рода превращения в RbCaF_3 существованием флуктуаций параметра порядка. Результаты работы подтверждают существование динамич. разупорядочения и ближнего порядка выше T_c в соответствии с современной теорией группы перенормировок. Библ. 25. А. Отко

RbCaF₃

1984

101:141382s Dynamics and disorder in rubidium calcium trifluoride above and below $T_c = 195$ K. Buzare, J. Y.; Simon, P. (Lab. Spectrosc. Solide, Fac. Sci. Mans, 72017 Le Mans, Fr.). *J. Phys. C* 1984, 17(15), 2681-8 (Eng). The first-order $O_h^1 \rightarrow D_{4h}^{18}$ phase transition in $RbCaF_3$ ($T_c = 195$ K) was investigated through detailed studies of EPR lines of $Gd^{3+}-O^{2-}$ substituted for a $Ca^{2+}-F$ -bond. Above and below T_c , the results were interpreted in the framework of Rousseau's model of octahedron precession. Above T_c , they gave evidence for the 2-dimensional character of the octahedron correlations, previously invoked to explain the fluctuation-induced 1st-order transition. The results are fully consistent with previous work and substantiate dynamic disorder and precursor order above T_c , in agreement with recent renormalization group theories.

T_c ;

C.A. 1984, 101, n 16

RbCaCl₃

1984

Seifert H. J., Thiel G.

$\Delta G, \Delta H,$ Thermochim Acta
 $\Delta S;$ 1984, 72 (1-2), 11-16.

(see RbMgCl₃ 4 pp.; I)

RbCaF₃

1984

1 E681. ЭПР центров $\text{Cd}^{3+}-\text{O}^{2-}$ в RbCaF_3 : данные о динамических явлениях и разупорядочении при структурном переходе $\text{O}_h^1 \rightarrow \text{D}_{4h}^{18}$. EPR of the $\text{Gd}^{3+}-\text{O}^{2-}$ center in RbCaF_3 : evidence for dynamics and disorder connected with the $\text{O}_h^1 \rightarrow \text{D}_{4h}^{18}$ structural phase transition. Simon P., Buzaré J. Y., Berlinger W., Müller K. A. «22 Congr. Ampère Magn. Resonan. and Relat. Phenom. Proc., Zürich, 10—15 Sept., 1984». Zürich, 1984, 28—29 (англ.)

При структурном фазовом переходе в RbCaF_3 ($T_c = 195 \text{ K}$) проявляется центральный пик (ЦП) рассеяния, сосуществующий с передемпфированным мягким фононом в области $T_c + 50 \text{ K}$. ЦП отражает формирование кластеров-предшественников упорядочения, эволюция которых сильно замедлена по сравнению с квазигармонич. колебаниями атомов в искаженной структуре. Метод ЭПР позволяет наблюдать локальное распределение и динамику параметра порядка. При $\text{H} \parallel [110]$ и $T < T_c$ ширина линий ЭПР определяется раз-

T_c;

сб. 1986, 18, 11

бросом углов поворота ϕ октаэдров CaF_6 в плоскости (001). При $T > T_c$ анализ формы линии показывает, что октаэдры совершают перескоки между двумя квазиравновесными ориентациями $\pm\phi$ с частотами ν_1 и ν_2 . Частота ν_1 , изменяющаяся от 0,8 ГГц при $T_c + 50$ К до 0,4 ГГц при $T_c + \epsilon$, в области ЦП уменьшается, что связано с нарастанием двумерных корреляций в слоях связанных октаэдров. Частота ν_2 , изменяющаяся в пределах 70—50 МГц в интервале от $T_c + 2$ К до T_c , связана с медленной динамикой границ тетрагональных кластеров. В ориентациях $H \parallel [100]$ или $\{001\}$ ЭПР отражает искажения, пропорциональные ϕ^2 . Наблюдения указывают на существование почти постоянного (ϕ порядка 1°) разупорядочения кубич. фазы в области от $T_c + 50$ К до 450 К и появление предпереходного упорядочения при $T < T_c + 50$ К. Результаты измерений согласуются с теорией ренормализационной группы и модельными представлениями о прецессии октаэдрич. комплексов в RbCaF_3 . А. Отко

RbCaF₃

1985

9 E744. Обнаружение оконечной критической точки на фазовой диаграмме RbCaF₃ при сжатии вдоль [111]. Evidence for a critical end point in [111]-stressed RbGaF₃. Buzaré J. Y., Berlinger W., Müller K. A. «J. Phys. Lett.» (Fr.), 1985, 46, № 5, 201—205 (англ.; рез. фр.)

Методом ЭПР на активных примесных центрах Gd³⁺—O²⁻ в RbGaF₃ установлено, что одноосное сжатие по направлению [111] при $\sigma > \sigma_E$ приводит к появлению на фазовой диаграмме новой линии переходов 2-го рода типа Изинга, которая разделяет псевдокубич. фазу от тригональной. Линия перехода подходит к фазовой границе перехода 1-го рода в тетраг. фазу под

фазов. диагр.

ф. 1985, 18, №9.

конечным углом. Таким образом, на фазовой диаграмме ($\sigma_{[111]}$, T) существует оконечная критич. точка при $\sigma_E = 0,10 \pm 0,01$ кбар и $T_E = 196,3 \pm 0,1$ К. Скачок параметра порядка при перемещении вдоль границы с тетраг. фазой изменяется монотонно и не имеет аномалии в критич. точке ($\sigma_{[111]}$, T). За исключением непосредственной окрестности тройной точки, вновь обнаруженная линия переходов 2-го рода хорошо описывается прямой с наклоном $dT_1/d\sigma_{[111]} = (11,8 \pm \pm 0,1)$ К/бар.

А. Отко

RbCaF₃

1985

22 Б3253. Фазовые переходы в RbCaF₃ и KCaF₃.
Phase transitions in RbCaF₃ and KCaF₃. Flocken J. W.,
Guenther R. A., Hardy J. R., Boyer L. L. «Jap. J. Appl.
Phys.», 1985, Pt 1, 24, Suppl. 2, 217—219 (англ.)

Проведены численные расчеты наименьшей статич. энергии решетки RbCaF₃ (I) и KCaF₃ (II), испытывающих фазовые переходы, связанные с нестабильностью на границе зоны Бриллюэна. Пт взаимодействия задавали в форме $U(r) = A \exp(B + Cr + Dr^2)$. Миним. статич. энергии и ионные смещения были получены для вращения октаэдров фтора вокруг направлений [1, 0, 0], [1, 1, 0] и [1, 1, 1]. Для I и II табулированы данные по изменению энергии и различным параметрам решетки в зависимости от изменения постоянной решетки a . Результаты расчетов для I находятся в хорошем соответствии с эксперим. данными. Для II наблюдается резкое расхождение в углах наклона, что возможно связано с низкой точностью вычислений при высоких температурах.

Г. Л. Апарников

фазовые
переходы

(4) X

X-1986, 19, №22

RbCaF₃

1985

103: 170175y Structural phase transitions of rubidium tri-fluorocalciate(1-). Hidaka, M.; Maeda, S.; Storey, J. S. (Dep. Phys., Kyushu Univ., Fukuoka, Japan 812). *Phase Transitions* 1985, 5(3), 219-32 (Eng). Sp. heat measurements, dielectric measurements and x-ray diffraction of RbCaF₃ show 2 1st-order transitions at 193 and 41 K. Structural information about these transitions was obtained using energy-dispersive x-ray diffraction. Successive transitions are $Pm3m \rightarrow I4/mcm \rightarrow Pmmm$ on cooling. These results are interpreted by successive condensation of an R₂ and an M₂₊₂₃ soft phonon mode from the ideal cubic phase.

(Gp)

C.A. 1985, 103, N20

Ca-Rb

1985

106: 163185a The Ca-Rb (calcium-rubidium) system. Pelton,
A. J. (Ec. Polytech.; Montreal, PQ Can.): *Bull. Alloy Phase
Diagrams* 1985, 6(1), 37 (Eng). A review with 1 ref.

(copy)

C. A. 1987, 106, N20.

Mg - Rb

1985

106: 163235b The Mg-Rb (magnesium-rubidium) system. Pelton, A. D. (Ec. Polytech., Montreal, PQ Can.). *Bull. Alloy Phase Diagrams* 1985, 6(1), 41-2, 99-100 (Eng). The Mg-Rb phase diagram was critically assessed.

фазовая
диаграмма

C.A. 1987, 106, N20.

Rb $\text{CaAl}_2(\text{K})$ (DM-22268)

1985

Seifert H. J., Uebach J.,

Kp, A5H,
A56; J. Solid State Chem,
1985, 59, N1, 86-94.

RbCaF_3

1985

5 БЗ157. Исследование структурного фазового перехода методом двумерного ЯМР с Фурье-преобразованием. Study of a structural phase transition by two dimensional Fourier transform NMR method. Trokiper A., Man P. P., Théveneau H., Papon P. «Solid State Commun.», 1985, 55, № 11, 929—931 (англ.)

Методом двумерного ЯМР с Фурье-преобразованием изучен фазовый переход в RbCaF_3 (I) из кубич. (O_h^1) в тетрагон. (D_{4h}^{18}) фазу ($T_c = 195,5$ К). Эксперим. проведены на монокристаллах I, ориентированных $H_0 // 110$, при 295, 195, 193 и 183 К. На ^{87}Rb 2D-спектрах пик при 58,6 кГц существуют для всех указанных т-р и относится к кубич. фазе. Др. сигнал при 117 кГц появляется при 195 К и м. б. приписан спинам с сильными квадрупольными взаимодействиями, что согласуется с образованием тетрагон. фазы. Дальнейшее понижение т-ры приводит к росту его амплитуды. Существование слабого пика при 58,6 кГц указывает на присутствие в тетрагон. фазе малого кол-ва кубич. доменов. Т. обр., при фазовом переходе в I сосуществуют две фазы. В. Ф. Пономарев

T_{tr}

X. 1986, 19, N 5

RbCaF₃

1985

3 E758. Исследование структурного фазового перехода методом ядерного магнитного резонанса с двумерным фурье-преобразованием. Study of a structural phase transition by two dimensional fourier transform NMR method. Trokiner A., Man P. P., Théveneau H., Rapin P. «Solid State Commun.», 1985, 55, № 11, 929—931 (англ.)

П.
тэ;

Метод ЯМР с двумерным фурье-преобразованием применен для изучения структурного перехода в RbCaF₃ при 195,5 К имеющего характер слабого перехода I-го рода и сопровождающегося появлением квадрупольного расщепления у ядер ⁸⁷Rb в низкотемпературной фазе. Особенностью данного метода является возможность разрешить сигналы от ядер, находящихся в различных

ф. 1986, 18, N 3

градиентах электрич. поля, по величине амплитуды эффективного радиочастотного поля. Частотные спектры ЯМР имеют при t -рах 195 и 193 К два четко выраженных пика, отвечающих сосуществованию фаз с различными квадрупольными взаимодействиями. При более низкой t -ре (183 К) система находится в однофазном состоянии.

А. Б.

RbCaF₃

1985

103: 132751a Study of a structural phase transition by two dimensional Fourier transform NMR method. Trokiner, A.; Man, P. P.; Theveneau, H.; Papon, P. (Lab. Dispos. Infrarouge Phys. Therm., ESPCI, 75231 Paris, Fr.). *Solid State Commun.* 1985, 55(11), 929-31 (Eng). The fluoroperovskite RbCaF₃ undergoes a structural phase transition at 195.5 K, from a cubic phase where the ⁸⁷Rb nuclei have no quadrupolar interaction ($\omega_Q = 0$) to a tetragonal phase where $\omega_Q \neq 0$. The transition is weakly first order. A 2-dimensional Fourier transform NMR expt. was performed on ⁸⁷Rb ($I = 3/2$) in a single crystal in both phases and in the vicinity of the phase transition. The results show the coexistence of the 2 phases at the phase transition.

T_{tr};

C. A. 1985, 103, N 16.

RbCaF₃

1986

Flocken J. W., Guenther

R. A., et al.

T₂;

Phys. Rev. Lett. 1986,
56 (16), 1738-41.

(see. KCaF₃; III).

RbCaF₃

1987

Nelmes R.J., Matton
R.D. et al.

14th Int. Congr. Crystal-
logr., Perth, 12-20 Aug.
1987. Collect. Abstr. Ned-
lands, ● 1988, 215.

T_{t2};

(cer. KMnF₃; I)

RbCaF₃

1988

2 E737. Изучение методом ЭПР Ni^{3+} в RbCaF_3 ниже температуры кубическо-тетрагонального фазового перехода. EPR study of Ni^{3+} in RbCaF_3 below the cubic-tetragonal phase transition / Alcalá R., Zorita E., Alonso P. J., Hangleiter Th., Spaeth J. M. // Solid State Commun.— 1988.— 68, № 1.— С. 167—170.— Англ.

Методом ЭПР исследованы ионы Ni^{3+} , возникшие в процессе рентгеновского облучения при комнатной т-ре RbCaF_3 , легированного Ni. Измерения спектров ЭПР проводились при т-рах ниже 60 К. Эти спектры описываются аксиальным спин-гамильтонианом с эффективным спином $s=1/2$ и $g_{\parallel}=3,833$, $g_{\perp}=4,370$. Аксиальное суперсверхтонкое взаимодействие иона Ni^{3+} с шестью ближайшими соседними анионами F^- наблюдалось с $A_{\parallel}=397$ МГц, $A_{\perp}=50$ МГц для двух из них и с $A_{\parallel}=446$ МГц, $A_{\perp}=53$ МГц для остальных четырех. Суперсверхтонкие тензоры этих четырех ионов F^- откло-

($\mathbb{P}_{t2}$)

X.1989, n3

ненны от кубич. направлений $\langle 100 \rangle$ на угол $\theta = 5,2^\circ$. Этот наклон, а также неэквивалентность суперсверхтонких взаимодействий F^- и анизотропия g -тензора связаны с фазовым переходом RbCaF_3 при 195 К. Высокотемпературная фаза имеет кубич. структуру перовскита. При T -рах ниже 195 К структурные октаэдры вращаются вокруг направления $\langle 100 \rangle$ и кубич. ячейка слегка удлиняется вдоль оси вращения, становясь тетрагональной.

А. И. Коломийцев



Rb₂CaCl₄

1988

108: 141025x Molecular-dynamics simulation of the structural phase transition in dirubidium tetrachlorocalciate. Billesbach, D. P.; Edwardson, P. J.; Hardy, J. R. (Dep. Phys. Astron., Univ. Nebraska, Lincoln, NE 68588-0111 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1988, 37(1), 236-42 (Eng). The structural phase transition of 1 member of A₂BX₄ layered perovskite-like compds., Rb₂CaCl₄, was simulated. This family of compds. may be thought of as being constructed from normal perovskite unit cells but with a different stacking arrangement. The simulation was done by using ab initio potentials with no adjustable parameters. The calcs. show a specific-heat anomaly at 400 K, which corresponds to an obsd. pseudorotation of the CaCl₆ octahedral group. This rotation is similar to the structural phase transitions obsd. in the perovskite-structure family. A dynamically disordered high-temp. structure for this compd. is also postulated.

Gp, Tt2

C.A. 1988, 108, N16

ReCaPO_4 Elammari L., 1988
Elouadi B., et al.,

(Tr, газ. nepexog) Phase Transitions
1988, 13 (1-4), 29-32.

Study of phase transitions
in.....
C. A. 1989, 110, N 12, 105454u.

RbCaH₃
Rb₂CaH₄

1988

19 Б2019. Два новых гидрида: RbCaH₃ и Rb₂CaH₄.
Deux nouveaux hydrures: RbCaH₃ et Rb₂CaH₄. Park
H y u n g - H o, Pezat M., Darriet B. «C. r. Acad. sci.»,
1988, sér. 2, 306, № 14, 963—965 (фр.; рез. англ.)

Проведено рентгенографич. изучение поликрист.
RbCaH₃ (I) и Rb₂CaH₄ (II), полученных при отжиге
стехиометрич. смесей соотв. простых гидридов при 400—
450° C/30 бар в атмосфере H₂ с послед. закалкой в
H₂O. I м. б. также получен при медленном охлаждении
образца. I имеет кубич., II — тетрагон. решетку с *a*
4,547; 4,507, *c* 14,863 Å, СТ I — перовскит, II — K₂NiF₄.
Приведены *I*, *d(hkl)* I и II. М. Б. Варфоломеев

структура

Х. 1988, 19, № 19

$RbCaH_3$
 Rb_2CaH_4

1988

9 E763. Два новых гидрида: $RbCaH_3$ и Rb_2CaH_4 .
Deux nouveaux hydrures: $RbCaH_3$ et Rb_2CaH_4 . Park
H y u n g - H o, Pezat Michel, Darriet Bernard. «C. r.
Acad. sci.», 1988, sér. 2, 306, № 14, 963—965 (фр.; рез.
англ.)

Методом рентгеновской дифракции исследованы про-
дукты твердофазовых реакций в системе $RbH-CaH_2$ с
различными молярными отношениями. Установлено су-
ществование двух новых тройных гидридов — $RbCaH_3$
и Rb_2CaH_4 . Первый кристаллизуется в кубич. системе со
структурой перовскита и параметром решетки $a =$
 $= 4,547$ Å. Rb_2CaH_4 имеет тетраг. структуру типа K_2Ni-
 F_4 ; параметры решетки $a = 4,507$ и $c = 14,863$ Å.

А. И. К.

Кристал-
структура

ср. 1988, 18, № 9

$RbCaF_3$

1988

) 3 E803. Структурный фазовый переход в $RbCaF_3$: исследование ядерного магнитного резонанса в ^{87}Rb при различных давлениях. The structural phase transition in $RbCaF_3$: an ^{87}Rb nuclear magnetic resonance investigation at various pressures / Trokiner A., Zanni-Theveneau H. // J. Phys. C.— 1988.— 21, № 28.— С. 4913—4930.— Англ.

Методом ЯМР исследован переход из кубической (пр. гр. $Pm\bar{3}m$) в тетраг. фазу (пр. гр. $I4/mmm$) при нормальном и высоком давлении (до 7 кбар) в $RbCaF_3$. На основе измерений времени спин-решеточной релаксации T_1 и константы квадрупольного взаимодействия ν_Q вблизи фазового перехода при 1, 3350 и 5400 бар получена линейная зависимость т-ры перехода от давления ($dT_c/dp = +2,7$ К/кбар). Эксперименты подтвердили существование трикритич. точки, в которой переход I рода меняется на переход II рода. Давление трикритич. точки ~ 5300 бар. Библ. 22. Е. С. Алексеев

T_{t2}

ср. 1989, № 3

Rb CaF₃

1988

110: 48827s The structural phase transition in rubidium trifluorocalciate: an rubidium-87 nuclear magnetic resonance investigation at various pressures. Trokiner, A.; Zanni-Theveneau, H. (Lab. Phys. Therm., ESPCI, 75231 Paris, Fr.). *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1988, 21(28), 4913-30 (Eng). The cubic-to-tetragonal structure phase transition of RbCaF₃ at atm. and high pressures was studied by NMR techniques. The spin-lattice relaxation time T_1 and the quadrupole coupling const. ν_Q were measured near the phase transition at 1, 3350 and 5400 bar, and thus the pressure dependence of the transition temp. T_c was deduced. The results are compared with those concerning other perovskites. A 2-dimensional Fourier-transform method based on the quadrupole interaction was used to show phase coexistence at $P = 1$ bar. At high pressure, there was developed a method based on pulse-length excitation to detect any phase coexistence. Finally, the change is discussed of the phase transition with increasing pressure.

phys. review

C.A. 1989, 110, N 6

RbCaF₃

1989

1 E789. Структура и динамика фторперовскита RbCaF₃. Structure and dynamics of the fluorperovskite, RbCaF₃ / Nosé Shuichi, Klein Michael L. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 9.— С. 5005—5010.— Англ.

Методом молекулярной динамики при постоянном давлении и T -ре в сочетании с моделью жестких ионов исследована структура и динамика фазовых переходов в RbCaF₃ со структурой перовскита. Ячейка моделирования состояла из $4 \times 4 \times 4$ элементарных ячеек (320 ионов). При понижении T -ры обнаружена аномалия при $T \sim 150$ К, связанная с переходом из кубич. структуры в тетрагональную или ромбическую. Параметры ромбической элементарной ячейки $n_1 = b + c = 6,1434$ А, $n_2 = -b + c = 6,1461$ А, $n_3 = 2a = 8,7040$ А. Динамич. исследование высокотемпературной кубич. фазы при 400 К позволило связать полученные мягкие моды с точками R и M зоны Бриллюэна. Показано, что переход связан с коллективным вращением октаэдров CaF₆.

Е. С. Алексеев

(T_{t2})

ф. 1989, №1

$RbCaCl_3$

1989

Темров В. А.,
Темрова Л. Д.

$4H_2$;

ж. пруд. химии.
1989. 62, № 3. С. 689-
-691.

(ср. $LiAlCl_4$; I)

$RbCaF_3$

1990

✓ 14 Б2392. Излучательные остоно-валентные переходы в кристалле $RbCaF_3$ / Родный П. А., Терехин М. А., Петров С. В. // Физ. тверд. тела (Ленинград). — 1990. — 32, № 10. — С. 3171—3173. — Рус.

Исследованы х-ки собственной ЛМ кристалла $RbCaF_3$ при импульсном рентгеновском и вакуумном УФ-синхротронном возбуждениях. Полученные эксперим. данные, с одной стороны, подтверждают модель остоно-валентных переходов (ОВЕ) в кристалле, а с другой — показывают, что с помощью относительно простых оптич. измерений можно определить параметры энергетич. зон объекта. Из люминесцентных х-к $RbCaF_3$ с учетом полученных ранее данных для $CsCaCl_3$ и BaF_2-LaF_3 можно сделать заключение, что «введение» дополнит. катиона в бинарное соедин. мало влияет на положение остоной зоны катиона, участвующего в ОВП, увеличивает ширину валентной зоны и, как правило, смещает спектр кратковременной ЛМ в длинноволновую область. В бикатионных галогенидах удается также получить большую интенсивность и меньшее время спада ЛМ, связанной с ОВП. Л. А. Д.

T_{t2}

х. 1991, № 14

$RbLaF_3$

1992

Koussinsa F., Bonnetot B.,
Diot M.,

Gp

Thermochem. Acta 1992,
206, c. 1-11.

(10-300K)

(all



$KLaF_3; I$)

RbCaF₃

1992

118: 201447e Effect of a phase transition on the intrinsic luminescence parameters of rubidium calcium fluoride (RbCaF₃). Rodnyi, P. A.; Voloshinskii, A. S. (St. Petersburg. Gos. Univ., St. Petersburg, Russia). *Fiz. Tverd. Tela (St.-Peterburg)* 1992, 34(8), 2544-7 (Russ). The structural phase transition in RbCaF₃ (I) at 198 K affects the decay time and spectral compn. of the crystal intrinsic luminescence related to core-valence transitions. The temp. dependence (77-300 K) of x-ray luminescence spectra of I were studied over the wavelength range 200-600 nm.

(T₁₂)

C.A. 1993, 118, N20

RbCaF_3

1994

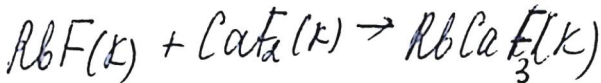
) 12 Б393. Эффект локального деблокирования структурного фазового перехода для Gd^{3+} в кристаллическом RbCaF_3 . Local release effect of a structural phase transition for Gd^{3+} in crystalline RbCaF_3 / Zheng W.-C. // Phys. Mag. B .— 1994 .— 70 , № 4 .— С. 851—854 .— Англ.

На основе лит. эксперим. данных по ЭПР примеси Gd^{3+} предложена модель структурного фазового перехода при 101 К кристаллов RbCaF_3 от кубич. к тетрагон. симметрии, включающая локальный фактор k для обозначения эффекта деблокирования зоны ВХ вдоль тетрагон. оси. С помощью этого фактора получено простое соотношение между расщеплением в нулевом поле для тетрагон. фазы и спин-решеточным коэф. вз-вия в кубич. фазе для парамагнитных ионов в перовскитной структуре. Величина k для Gd^{3+} определена из данных ЭПР для обеих фаз.

В. А. Ступников

(T_{t2})

X. 1995, N12



1995

124: 300126e Energetics of the $\text{RbF} + \text{CaF}_2 \rightarrow \text{RbCaF}_3$ solid state reaction: a first-principles study. Florez, M.; Recio, J. M.; Martin Pendas, A.; Francisco, E.; Luana, V. (Departamento de Quimica Fisica y Analitica, Universidad de Oviedo, Oviedo, Spain E-33006). *Radiat. Eff. Defects Solids* 1995, 134(1-4), 193-6 (Eng). The preliminary results of a theor. calcn. of relevant thermodyn. magnitudes involved in the $\text{RbF} + \text{CaF}_2 \rightarrow \text{RbCaF}_3$ solid state reaction are reported. Pairwise and quantum-mech. simulations are combined to det. the static equations

of state for the three crystals involved in this heterogeneous reaction. The std. enthalpy and vol. of the reaction (ΔH° , ΔV°) and the dependence of ΔH and ΔV with pressure are computed. Finally, the influence of crystal polymorphism in these magnitudes is examd.

$(\Delta H^\circ, \Delta V^\circ)$

C. A. 1996, 124, N 22