ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КРУГОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ДИФРАКЦИОННЫХ И СПЕКТРАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ

© 2022 г. Е. Н. Овчинникова¹, К. А. Козловская^{1,*}, В. Е. Дмитриенко², А. П. Орешко¹

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

² Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия *E-mail: kozlovskaya@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 04.02.2022 г. После доработки 04.02.2022 г. Принята к публикации 18.03.2022 г.

Рассмотрены возможности, которые дает использование рентгеновского излучения с круговой поляризацией в геометрии пропускания и дифракции для изучения свойств нецентросимметричных кристаллов: электронных состояний, оптической активности, абсолютной хиральности и распределения хиральных доменов в мультиферроиках.

DOI: 10.31857/S0023476122060200

введение

Цель настоящей работы – обратить внимание на новые возможности, которые дает использование циркулярно поляризованного рентгеновского излучения для исследования локальных свойств магнитных и нецентросимметричных кристаллов. Постановка задачи проведения таких поляризационных измерений стала актуальной только после появления источников синхротронного излучения, поскольку лабораторные источники принципиально не дают такой возможности. Особенно проблематичным представлялось создание рентгеновского циркулярно поляризованного излучения, которое в оптике видимого диапазона реализуется с помощью четвертьволновой пластинки, что ранее было невозможно в рентгеновском лиапазоне ллин волн. Илея созлания такой пластинки была независимо предложена в [1-3], она основана на использовании линейного двупреломления вблизи областей с дифракционным рассеянием в монокристаллах (подробнее в обзорах [4, 5]). Недостатком таких четвертьволновых рентгеновских пластинок, которые имеются сейчас на многих синхротронных станциях, является то, что они «работают» в определенных интервалах длин волн и требуют тщательной ориентации. Эта проблема отсутствует при использовании специального типа ондуляторов, создающих циркулярную поляризацию излучения, имеющихся на некоторых станциях, например ID12 ESRF [6].

Эффективность использования поляризованного излучения для исследования магнитных структур давно обоснована и успешно применяется. При исследовании магнетизма в кристаллах или наноструктурах особенно востребованным является метод рентгеновского кругового дихроизма **XMCD** (X-ray Magnetic Circular Dichroism) на L₂₃-краях переходных металлов [6–10]. Благодаря использованию правил сумм [11-13] измерение коэффициентов поглощения право- и левополяризованных волн, а также их разности (т.е. дихроизма XMCD) позволяет отдельно изучать спиновый и орбитальный вклады в магнитный момент атома. В антиферромагнетиках направление антиферромагнитной оси может быть определено с помощью XMLD (X-ray Magnetic Linear Dichroism) с использованием зависимости коэффициента поглощения от угла между вектором поляризации излучения и выделенным антиферромагнитной осью направлением [14]. Создание пучков с малым размером позволило проводить визуализацию распределения магнитных доменов по поверхности образца, изучать связь между доменами в разных слоях многослойных пленок [15], а также использовать циркулярную поляризацию синхротронного излучения в микроскопии магнитных наноструктур [16]. Еще более перспективным является использование для этих целей когерентного рентгеновского излучения [17].

Циркулярно поляризованное рентгеновское излучение дает большие перспективы и для исследования распределения доменов с разной хиральностью. Определение абсолютной хирально-

сти вещества является достаточно нетривиальной задачей, которая особенно актуальна в биологии и мелицине. Если вешество не является прозрачным для волн видимого диапазона. то необходимо использовать рентгеновское излучение. Давно известный метод аномальной дифракции при ллинах волн. близких к краям поглошения атомов вещества, позволяет решить эту задачу. Однако возможность создания циркулярно поляризованного рентгеновского излучения привела к развитию и других методов. В частности, одним из них является XNCD (X-ray Natural Circular Dichroism), впервые реализованный на станции ID12 ESRF и продемонстрированный на значительном количестве разнообразных объектов, как на неорганических кристаллах, так и на органических [18–20]. Условием для наблюдения XNCD является отсутствие центра симметрии у исследуемого объекта, а также наличие смешанных p-dэлектронных состояний. Использование пучков малого размера позволяет провести визуализацию распределения доменов различной хиральности в том случае, если кристалл является рацемическим, т.е. состоит из одинакового числа правых и левых доменов. В этом случае сигнал от целого объекта может отсутствовать. Такой эксперимент был выполнен на станции ID12 ESRF. Поверхность мультиферроика $RFe_3(BO_3)_4$ сканировалась пучком размером 30 × 30 мкм сначала с правой, а затем с левой круговой поляризацией [21]. Было обнаружено, что знак сигнала кругового дихроизма меняется при сканировании по определенной части кристалла, что означает наличие домена иной хиральности, чем остальная часть сканируемой области. В случае, когда в размер пучка попадают несколько областей разной хиральности, сигнал кругового естественного дихроизма может отсутствовать. Большие перспективы для визуализации нанообъектов имеет использование дифракции когерентного рентгеновского излучения [22].

Поляризационный анализ прошедшего и рассеянного излучения становится все более распространенным. Наиболее часто используются линейные σ- и π-поляризации. Линейный дихроизм использовался в геометрии поглощения, например, для изучения распределения соединений кальция в костной ткани [23]. В области рентгеновских частот эффекты преломления малы, но при энергиях вблизи краев поглощения их необходимо учитывать наряду с изменением поляризации при распространении волн в среде. Обычно эти эффекты не принимались во внимание, но в последнее время достигнут существенный прогресс как в теории, так и в проведении экспериментальных исследований, направленных на создание полноценной поляриметрии в рентгеновской области [24-28].

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КРУГОПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В РЕЗОНАНСНОЙ ДИФРАКЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Изменение поляризации рентгеновского излучения в процессе рассеяния возможно не только вблизи краев поглощения, но и, например, в нерезонансном магнитном рассеянии или при многоволновом отражении. Вблизи краев поглощения амплитуда рассеяния анизотропна, она описывается матрицей размерности 2 × 2 в поляризационных индексах. и в общем случае содержит как диагональные, так и недиагональные элементы [29]. Измерение σσ'-, ππ'- и σπ'-компонент матрицы является обычным делом при исследовании «запрещенных» отражений при энергиях вблизи краев поглощения атомов [30, 31] (здесь $\sigma, \sigma', \pi, \pi'$ – векторы линейных поляризаций падающего и дифрагированного излучения). Такие измерения требуют использования кристалла-анализатора, а также надежного знания поляризации падающего излучения. В качестве анализаторов, как правило, используются кристаллы. в которых имеются отражения с углом Брэгга 45° при нужной энергии излучения. Так как очень редко угол точно равен такой величине, а падающее излучение может содержать примесь ортогональной поляризации, то всегда есть опасность, что измеренный сигнал измеряется не с высокой степенью точности.

Использование кругополяризованного рентгеновского излучения для изучения магнитных свойств вещества также дает интересные результаты, например, в [31–34] оно применялось для исследования свойств мультиффероиков $Ni_3V_2O_8$ и TbMnO₃. Эти вещества обладают как магнитной структурой, так и спонтанной электрической поляризацией.

Использование круговых поляризаций падающего рентгеновского излучения в экспериментах по резонансной дифракции синхротронного излучения продемонстрировало предложенную много лет назад [35] возможность определения абсолютной хиральности кристаллов. В качестве примеров на синхротроне SPring-8 были измерены запрешенные отражения 001 в кварце [36]. Показано различие интенсивности отражений, измеренных с правой или левой круговой поляризациями, что эквивалентно замене на образец противоположной хиральности. Подобное исследование было проведено в кристалле теллура [37], а в [38] дифракция кругополяризованого синхротронного излучения была использована для изучения хирального мотива квадрупольных моментов и его доменной структуры в монокристаллическом образце DyFe₃(BO₃)₄. Для этого дифракционный сигнал снимался при сканировании малым пуч-



Рис. 1. Энергетические спектры отражений типа (110) и (330) (сплошные линии) и спектры кругового дихроизма (пунктирные линии) в кристалле метабората меди CuB_2O_4 при энергиях падающего излучения, близких к *К*-краю поглощения меди.

ком с правой и левой круговыми поляризациями по поверхности кристалла.

Для характеристики различия интенсивности рассеянных волн с двумя ортогональными круговыми поляризациями часто используется понятие параметра асимметрии:

$$k = \frac{I^R - I^L}{I^R + I^L},\tag{1}$$

где I^R – интенсивность рассеяния падающего излучения с правой поляризацией, а I^L – с левой.

Однако это определение плохо применимо при изучении запрещенных отражений, так как при отклонении энергии излучения от края поглощения их интенсивность обращается в нуль. Можно использовать следующее определение для кругового дихроизма в геометрии рассеяния:

$$\Delta I = I^R - I^L. \tag{2}$$

Сигнал дифракционного кругового дихроизма можно представить через компоненты матрицы структурной амплитуды в линейных поляризациях:

$$\Delta I(hkl) = I^{R} - I^{L} =$$

$$= 2[F'_{\pi'\pi}F''_{\pi'\sigma} - F'_{\pi'\sigma}F''_{\pi'\pi} + F'_{\sigma\pi}F''_{\sigma\sigma} - F'_{\sigma\sigma}F''_{\sigma\pi}], \qquad (3)$$

где *F*' и *F*'' – действительная и мнимая части матрицы структурной амплитуды, σ , σ' , π , π' – векторы линейных поляризаций падающего и дифрагированного излучения. Из выражения (3) следу-

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 67 № 6 2022

ет, что круговой дихроизм в дифракционном отражении может присутствовать, только если в рассеянии присутствуют недиагональные члены, описывающие рассеяние с изменением поляризации. В [39] показано, что круговой дихроизм в запрещенном отражении может наблюдаться не только в хиральных кристаллах, но и в любых нецентросимметричных структурах.

На рис. 1 представлены результаты измерения запрешенных отражений 110 и 330 в метаборате меди CuB_2O_4 , измеренные на станции ID12 ESRF. Из рисунка видно, что, хотя отражение 330 является гораздо более сильным, дихроизм в этом отражении мал, тогда как в отражении 110 его величина почти равна величине самого отражения. Это говорит о том, что данный кристалл отражает почти полностью только левополяризованное рентгеновское излучение при энергии падающего излучения вблизи К-края поглощения меди. В работе также измерены азимутальные зависимости энергетических спектров запрешенных отражений и кругового дихроизма. Показано, что полученный набор данных позволяет определить некоторые физические параметры, характеризующие расщепление электронных состояний в кристаллическом поле.

Широкое применение метода, основанного на изучении кругового дихроизма в запрещенных отражениях, ограничено тем, что группа симметрии исследуемой структуры должна быть несимморфной, хотя многие функциональные



Рис. 2. Рассчитанные интенсивности $I_{\pi\pi}$, $I_{\pi\sigma}$ и $I_{\sigma\pi}$ компонент отражения 202 в кристалле FeTe для энергий падающего излучения, близких к *K*-краю поглощения железа (а); рассчитанные интенсивность отражения 202 с правой поляризацией, а также сигнал кругового дихроизма в отражении 202 (б).

материалы описываются симморфными группами симметрии. В [40] предложено использовать поляризационный анализ для изучения разрешенных отражений. Во многих случаях при энергии вблизи краев поглощения в дифракционном отражении содержится резонансный вклад с измененной поляризацией, но он маскируется гораздо более сильным нерезонансным рассеянием. Одним из путей выделения резонансного вклада в дифракционное отражение является измерение σπ рассеяния с помощью кристалла-анализатора. Кроме того, желательно выбирать достаточно слабые брэгговские отражения. В [41] показано, что измерение энергетических спектров слабых отражений (без анализа поляризации) в титанате стронция SrTiO₃ позволило наблюдать малые (порядка пикометров) атомные смещения при помещении кристалла в электрическое поле.

Впервые величина кругового рентгеновского дихроизма для разрешенного отражении 300 была измерена на станции ID12 ESRF в кристалле оксида цинка ZnO [42]. Точечная группа симметрии этого кристалла 6*mm* запрещает существование сигнала XNCD, но допускает существование векторного вклада в оптическую активность (вектор Войта–Федорова), который в рентгеновской области частот определяется диполь-квадрупольным мультипольным вкладом в тензор восприимчивости. Выполненное измерение сигнала кругового дихроизма в специально выбранной геометрии позволило обнаружить данный вклад.

Измерение кругового дихроизма разрешенных отражений может быть целесообразно также в тех случаях, когда выделение вклада с измененной поляризацией $\sigma \leftrightarrow \pi$ затруднительно, например, из-за того, что не удается подобрать хороший кристалл-анализатор или поляризация падающего излучения не четко фиксирована. Как следует из выражения (3), сигнал кругового дихроизма представляет собой комбинацию диагональных и недиагональных компонент матрицы амплитуды рассеяния, но не содержит вкладов только от диагональных компонент. Это исключает примесь чисто нерезонансных вкладов в сигнал дихроизма. Кроме того, из-за большого вклада от диагональных компонент сигнал кругового дихроизма может быть достаточно большим, в то время как интенсивность отражения с измененной поляризацией может быть мала. На рис. 2 приведен расчет интегральной интенсивности разрешенного отражения 202 в кристалле с пр. гр Р4/птт, в качестве примера использован кристалл FeTe. На рис. 2а представлен расчет интенсивности $\pi\pi$, $\pi\sigma$ и $\sigma\pi$ компонент отражения 202 (предполагается, что падающее излучение π – поляризовано) при



Рис. 3. Азимутальные зависимости интенсивности отражения 001 в правом и левом изомерах кварца, рассчитанные (два верхних графика) и измеренные с двумя ортогональными круговыми поляризациями при энергии падающего излучения 4.5 КэВ (два нижних графика). Серая и черная линии соответствуют противоположным поляризациям падающего излучения.

энергиях излучения, близких к К-краю поглощения железа (7112 эВ). На рис. 26 показаны интегральная интенсивность отражения 202 лля правой круговой поляризации и разность интенсивности отражения с правой и левой круговыми поляризациями. Расчеты были выполнены с помощью программы FDMNES [43] по методу многократного рассеяния. Из сравнения рис. 2а и 26 видно, что сигнал кругового дихроизма значительно сильнее, чем интенсивность $\sigma \leftrightarrow \pi$ канала рассеяния. Существует, однако, опасность присутствия вклада от линейного дихроизма, но этот вопрос можно решить, измеряя сигнал кругового дихроизма при двух значениях азимутального угла, для которых сигнал имеет противоположный знак.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АБСОЛЮТНОЙ ХИРАЛЬНОСТИ КРИСТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЦИРКУЛЯРНО ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Как упоминалось выше, определение абсолютной хиральности вещества представляет со-

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 67 № 6 2022

бой непростую задачу, для решения которой используются рентгеновские методы в геометрии поглощения и дифракции при энергии падающего излучения вблизи краев поглощения. В [44] предложен и апробирован новый подход к определению абсолютной атомной структуры хиральных кристаллов по азимутальным зависимостям интенсивности многократных отражений (рефлексы Реннингера), измеренных с правой и левой круговыми поляризациями падающего излучения в случае, когда однократное рассеяние рефлекса запрещено (запрещенное отражение). Для отработки методики использованы два кристалла кварца с известными правой и левой конфигурациями. Измерения были выполнены на станции ID12 ESRF. На рис. 3 представлены азимутальные зависимости отражения 001, измеренные с правой и левой круговыми поляризациями на кристалле кварца с правой и левой энантиоморфными конфигурациями. Из рисунка видно, что изменение круговой поляризации падающего излучения приводит к появлению сигнала кругового дихроизма, который меняет знак при замене хиральности образца. Несмотря на кажущуюся сложность данного метода, он имеет огромное преимущество перед другими, так как не требует громоздких квантово-механических вычислений и может быть реализован при любых длинах волн, далеких от краев поглощения атомов вещества.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что в последние годы создано несколько методов с использованием круговой поляризации рентгеновского излучения в геометрии брэгговской дифракции, которое не только важно для изучения хиральности вещества, но при дальнейшем развитии позволит получить некоторую количественную физическую информацию о расщеплении электронных состояний в кристаллах [39]. Предлагаемые методы могут быть реализованы не только для запрещенных, но и для разрешенных отражений. Однако в последнем случае требуется очень высокая степень круговой поляризации, поскольку даже небольшое количество линейной поляризации может существенно исказить результаты.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-52-12029), при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2021-1353). Работа В.Е. Дмитриенко выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Баранова Н.Б., Зельдович Б.Я. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 1779.
- 2. Дмитриенко В.Е., Беляков В.А. // Письма в ЖТФ. 1980. Т. 6. С. 1440.
- 3. Пономарёв Ю.В., Турутин Ю.А. // Кристаллография. 1982. Т. 52. Вып. 1. С. 185.
- Беляков В.А., Дмитриенко В.Е. // Успехи физ. наук. 1989. Т. 158. С. 679.
- Rogalev A., Goulon J., Goulon-Ginet C. et al. // Magnetism and Synchrotron Radiation. Lecture Notes in Physics / Eds. Eric Beaurepaire et al. Berlin; Heidelberg: Springer, 2001. V. 565. P. 60. https://doi.org/10.1007/3-540-44954-x_3
- Rogalev A., Fabrice W., Nicolas J. et al. // Lect. Notes Phys. 2006. V. 697. P. 71. https://doi.org/10.1007/3-540-33242-1 4
- Van Der Laan G., Thole B.T., Sawatzky G.A. et al. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 6529. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.6529
- Schtz G., Wagner W., Wilhelm W. et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 737. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.737

- Schtz G., Frahm R., Mautner P. et al. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 2620. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.2620
- Chen C.T., Sette F., Ma Y. et al. // Phys. Rev. B. 1990.
 V. 42. P. 7262. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.7262
- Thole B.T., Carra P., Sette F. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 1943. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.7262
- Carra P., Thole B.T., Altarelli M. et al. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 694. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.694
- 13. *Altarelli M.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 597. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.597
- Van Der Laan G., Arenholz E., Chopdekar R.V. et al. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.064407
- Nolting A., Scholl J., Stohr J.W. et al. // Nature. 2000. V. 405. P. 767. https://doi.org/10.1038/35015515
- Stöhr J., Wu Y., Hermsmeier B.D. et al. // Science. 1993. V. 259. P. 658. https://doi.org/10.1126/science.259.5095.658
- Duckworth T.A., Ogrin F., Dhesi S.S. et al. // Opt. Express. 2011. V. 19. P. 16223. https://doi.org/10.1364/oe.19.016223
- Alagna L., Prosperi N., Turchini S. et al. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4799. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4799
- Goulon J., Goulon-Ginet C., Rogalev A. et al. // J. Chem. Phys. 1998. V. 108. P. 6394. https://doi.org/10.1063/1.476046
- Goulon J., Rogalev A., Wilhelm F. et al. // J. Exp. Theor. Phys. 2003. V. 97. P. 402. https://doi.org/10.1063/1.476046
- Platunov M.S., Gudim I.A., Ovchinnikova E.N. et al. // Crystals. 2021. V. 11. P. 1. https://doi.org/10.3390/cryst11050531
- 22. Li N., Labat S., Leake S. et al. // ACS Nano. 2020. V. 14. P. 10305. https://doi.org/10.1021/acsnano.0c03775
- Stifler C.A., Wittig N.K., Sassi M. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2018. V. 140. P. 11698. https://doi.org/10.1021/jacs.8b05547
- 24. Lovesey S.W., Collins S.P. // J. Synchrotron Rad. 2001. V. 8. P. 1065. https://doi.org/10.1107/S0909049501007452
- Joly Y., Collins S.P., Grenier S. et al. // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.220101
- 26. Lovesey S.W., Scagnoli V., Dobrynin A.N. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2014. V. 26. P. 125504 . https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/12/125504
- Lovesey S.W., Collins J.T., Collins S.P. // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. P. 1. https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/12/125504
- Schmitt A. T., Joly Y., Schulze K.S. et al. // Optica. 2021. V. 8. P. 56. https://doi.org/10.1364/optica.410357

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 67 № 6 2022

- 29. Dmitrienko V.E., Ishida K., Kirfel A. // Acta Cryst. A. 2005. V. 61. P. 481. https://doi.org/10.1107/S0108767305018209
- Collins S.P., Laundy D., Stunault A. // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. V. 13. P. 1891. https://doi.org/10.1088/0953-8984/13/9/312
- Fabrizi F., Walker H.C., Paolasini L. et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.237205
- 32. *Kenzelmann M., Harris A.B., Aharony A. et al.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.014429
- 33. Kenzelmann M., Harris A., Jonas S. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.087206
- 34. Lawes G., Harris A.B., Kimura T. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.087205
- 35. *Dmitrienko V.E.* // Acta Cryst. A. 1983. V. 39. P. 29. https://doi.org/10.1107/S0108767383000057
- Tanaka Y., Takeuchi T., Lovesey S.W. et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. P. 1. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.145502
- Tanaka Y., Collins S.P., Lovesey S.W. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2012. V. 24. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.145502

 Usui T., Tanaka Y., Nakajima H. et al. // Nat. Mater. 2014. V. 13. P. 611. https://doi.org/10.1038/nmat3942

891

- 39. Ovchinnikova E.N., Rogalev A., Wilhelm F. et al. // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 1455. https://doi.org/10.1107/S1600577521005853
- 40. Овчинникова Е.Н., Дмитриенко В.Е., Козловская К.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 110. С. 563. https://doi.org/10.1134/s0370274x19200098
- 41. *Richter C., Zschornak M., Novikov D. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. P. 1. https://doi.org/10.1038/s41467-017-02599-6
- 42. Goulon J., Jaouen N., Rogalev A. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. V. 19. P. 156201. https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/15/156201
- 43. Bunău O. Ramos A.Y., Joly Y. Crystallography: The FDMNES code // International Tables for Crystallography. V. I. X-ray Absorption Spectroscopy and Related Techniques. 2021. https://doi.org/10.1107/S1574870720003304; http://fdmnes.neel.cnrs.fr
- 44. *Kozlovskaya K., Ovchinnikova E., Kokubun J. et al.* // Crystals. 2021. V. 11. № 1389. P. 1. https://doi.org/10.3390/cryst11111389