

УДК 538.955

ВОЗБУЖДЕНИЯ ТИПА ДОМЕННОЙ СТЕНКИ В ГЕЛИКОИДАЛЬНОЙ ФАЗЕ СПИНОВОЙ ЦЕПОЧКИ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ОБМЕННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

© 2025 г. В. Я. Кривнов^{1*}, Д. В. Дмитриев¹¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: krivnov@deom.chph.ras.ru

Поступила в редакцию 26.03.2024

После доработки 24.04.2024

Принята в печать 20.05.2024

Изучена классическая модель гейзенберговской спиновой цепочки с обменными взаимодействиями ферро-(F) и антиферромагнитного (AF) типов. Эта модель используется для качественного описания свойств купратов с краевым зацеплением. Модель характеризуется параметром фрустрации, который является отношением констант AF- и F-взаимодействий. В зависимости от величины этого параметра основное состояние является либо ферромагнитным, либо синглетным со спиновыми корреляциями геликоидального (спирального) типа. Основное внимание уделено исследованию возбужденных состояний в спиральной фазе, которые представляют собой доменные стенки, разделяющие в этой фазе области с противоположной хиральностью. Показано, что эти возбуждения отделены щелью от основного состояния и их энергия определяет масштаб температур, при котором происходит фазовый переход из спирального в ферромагнитное состояние. Вычисленные энергии возбуждений доменных стенок использованы для построения линии Лифшица на фазовой диаграмме.

Ключевые слова: спиновая цепочка, фрустрация, купраты с краевым зацеплением, хиральные доменные стенки, граница Лифшица.

DOI: 10.31857/S0207401X25030061

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические и экспериментальные исследования низкоразмерных магнетиков с конкурирующими обменными взаимодействиями вызывают в последние годы большой интерес [1]. Одним из важных классов таких соединений являются цепочки квадратных блоков CuO_4 , соединенных в вершинах (купраты с краевым зацеплением). В этих соединениях магнитными являются ионы двухвалентной меди Cu^{2+} , имеющие спин $s = 1/2$, и взаимодействие между соседними ионами Cu^{2+} является ферромагнитным, а между следующими за соседними — антиферромагнитным. В последние годы был синтезирован целый ряд купратов с краевым зацеплением, в которых эти взаимодействия сравнимы по величине и их конкуренция приводит к фрустрации. К числу таких купратов относятся, например, Li_2CuO_2 , $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$, $\text{PbCuSO}_4(\text{OH})_2$, $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ и другие и происходит постоянное появление новых соединений этого типа. Базовой моделью для их

описания является модель гейзенберговской спиновой цепочки с обменными взаимодействиями ферро- (F) и антиферромагнитной (AF) типов, гамильтониан которой имеет вид

$$H = J_1 \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}, \quad (1)$$

где \mathbf{S}_i — оператор спина $1/2$ на i -том узле, а J_1 и J_2 — ферро- и антиферромагнитные обменные интегралы, ($J_1 < 0$, $J_2 > 0$).

Модель (1) характеризуется параметром фрустрации $\alpha = J_2/|J_1|$. Фазовая диаграмма основного состояния квантовой модели (1) была изучена в ряде работ [2–11]. Основное состояние модели (1) ферромагнитно при $\alpha < 1/4$. При $\alpha = 1/4$ происходит квантовый переход из ферромагнитного основного состояния в синглетное со спиновыми корреляциями геликоидального типа (“спиральное” основное состояние). Замечательно, что этот переход происходит при одном и том же значении $\alpha = 1/4$ как для квантовой модели (1), так и для классической версии этой модели, в которой опе-

раторы \mathbf{S}_i заменяются классическими векторами $\mathbf{S}_i = s\mathbf{n}_i$, где \mathbf{n}_i — единичный вектор.

Хотя многие свойства модели (1) к настоящему времени хорошо изучены, остается ряд менее исследованных свойств, которые важны для понимания поведения реальных соединений при низких температурах. Это касается, например, структуры основного состояния и спектра возбуждений в спиральной фазе при значениях параметра фрустрации α , близких к критическому $\alpha_c = 1/4$. Эта задача будет рассмотрена в данной работе. Она интересна, в частности, и потому, что параметр фрустрации в ряде купратов близок к критическому значению. Например, оценка этого параметра, полученная из анализа экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов и ЯМР [11, 12], дает для Li_2CuO_2 и PbCuSO_4 значение $\alpha \approx 0.3$.

В настоящее время свойства основного состояния и низкотемпературная термодинамика квантовой F–AF модели (1) при $\alpha = 1/4$ могут быть изучены либо путем численных расчетов конечных цепочек, либо приближенными методами. С другой стороны, классическая версия модели (1) может быть исследована аналитическими методами. Известно, что квантовая и классическая ферромагнитные цепочки ($\alpha = 0$) имеют универсальное низкотемпературное поведение [9, 13]. Например, низкотемпературная намагниченность ферромагнитной цепочки с любым спином s , включая классический, является функцией универсальной (скейлинговой) переменной $s^3 J_i h / T^2$. Хотя такая универсальность для фрустрированных ферромагнетиков строго не доказана, можно ожидать, что она имеет место также и для F–AF-цепочки, по крайней мере при значении α , близком к критическому [9]. Например, температурная зависимость магнитной восприимчивости классической модели при $\alpha \geq 1/4$ качественно согласуется с полученной в численных расчетах температурной зависимостью для квантовой модели, а также и с экспериментальными данными для реальных соединений. Следовательно, изучение классической F–AF-модели в окрестности точки перехода при $\alpha = 1/4$ важно и для понимания свойств квантовой F–AF-цепочки. Термодинамика классической F–AF-модели в окрестности точки перехода была изучена нами ранее в работе [14]. Было показано, что вычисление статистической суммы этой модели сводится к решению квантомеханической

задачи о частице в туннельном потенциале. Было выяснено, что переход из геликоидальной фазы, являющейся основной при $\alpha > 1/4$, в ферромагнитную происходит при критической температуре $T_c \sim (\alpha - 1/4)^{3/2}$. Однако было неясно, какого рода возбуждения геликоидальной фазы ответственны за этот переход. В данной работе мы изучим свойства основного и возбужденных состояний геликоидальной фазы и покажем, что вышеуказанный переход обусловлен возбуждениями специального типа — доменными стенками в однородной геликоидальной фазе.

2. СПИНОВАЯ МОДЕЛЬ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ПЕРЕХОДА

В окрестности точки перехода при $\alpha = 1/4$ удобно представить гамильтониан (1) в виде

$$H = \frac{1}{8} \sum (\mathbf{S}_{i+1} - 2\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i-1})^2 - \frac{1}{2} \left(\alpha - \frac{1}{4} \right) \sum (\mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_i)^2. \quad (2)$$

В уравнении (2) мы положили $|J_1| = 1$.

Далее мы будем рассматривать классическую версию гамильтониана (2) при $(\alpha - 1/4) \ll 1$. В низкотемпературном пределе тепловые флуктуации малы, а угол поворота спирали мал при $(\alpha - 1/4) \ll 1$, так что соседние спины почти параллельны друг другу. Следовательно, можно использовать континуальное приближение и заменить набор классических векторов \mathbf{n}_i векторным полем $\mathbf{n}(x)$. Тогда

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_{i+1} - 2\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i-1}) &\approx s \frac{\partial^2 \mathbf{n}}{\partial x^2}, \\ (\mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_i) &\approx 2s \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x}. \end{aligned} \quad (3)$$

С использованием приближения (3) гамильтониан (2) может быть представлен в виде функционала энергии:

$$E = s^2 \int \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{n}}{\partial x^2} \right)^2 - \frac{\gamma}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \quad (4)$$

где $\gamma = (4\alpha - 1)$. Векторное поле $\mathbf{n}(x, t)$ определено угловыми переменными $\varphi(x, t)$ и $\theta(x, t)$ как $\mathbf{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$.

Вдали от точки перехода при $\alpha = 1/4$ первый член в подинтегральном выражении (4) мал по сравнению со вторым. Однако при $\gamma \ll 1$ этот член

является преобладающим. Функционал энергии в угловых переменных θ и φ принимает довольно громоздкий вид. Численный анализ функционалов этого типа [15, 16] показывает, что минимум энергии (4) достигается либо при $\varphi = \text{const}$, либо при $\theta = \text{const}$. Физически это означает, что при включении сколь угодно малой анизотропии взаимодействий вдоль любой оси (X , Y или Z) минимум энергии достигается либо при $\varphi = \text{const}$, либо при $\theta = \text{const}$. В дальнейшем принимается, что угол φ имеет постоянное значение. Тогда уравнение (4) примет вид

$$E = s^2 \int \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right)^2 + \frac{1}{8} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^4 - \frac{\gamma}{2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 \right] dx. \quad (5)$$

В уравнении (5) удобно ввести замену переменной $x = \xi / \sqrt{2\gamma}$, после чего функционал энергии принимает вид

$$E = \frac{s^2 \gamma^{3/2}}{2^{3/2}} \int \left[\left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^4 - 2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^2 \right] d\xi. \quad (6)$$

Как следует из уравнения (6), отношение $E/\gamma^{3/2}$ не зависит от γ , т.е. энергия нормирована на $\gamma^{3/2}$.

Варьируя функционал (6) по $\theta(\xi)$, получим для $\theta(\xi)$ нелинейное уравнение Эйлера:

$$\frac{\partial^4 \theta}{\partial \xi^4} - 6 \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} = 0. \quad (7)$$

Это уравнение имеет тривиальное решение: $\theta(\xi) = \pm(\xi - \xi_0)$, описывающее спиральную конфигурацию спинов. Это решение соответствует основному состоянию спиральной фазы, и ее энергия равна $E_{min} = -1/2 L s^2 \gamma^2$.

Заметим, что основное спиральное состояние двукратно вырождено относительно хиральности спирали (закрученности по и против часовой стрелки). Наряду со спин-волновыми возбуждениями в спиральной фазе важную роль играют кинки (доменные стенки), разделяющие области с противоположной спиральностью. Для нахождения этих состояний необходимо найти другие, нетривиальные решения уравнения Эйлера (7). В этом случае удобно ввести функцию $y(\xi) = \partial \theta / \partial \xi$, которая удовлетворяет уравнению

$$(y'' - 2y^3 + 2y)' = 0, \quad (8)$$

где $y' = \partial y / \partial \xi$.

Интегрирование уравнения (8) приводит к дифференциальному уравнению для $y(\xi)$:

$$(y')^2 = y^4 - 2y^2 + Ay + B, \quad (9)$$

где A и B — постоянные.

Функционал энергии, выраженный через $y(\xi)$, принимает вид, подобный выражению для свободной энергии в известной модели Кана—Хиллиарда для спонтанного разделения фаз бинарного вещества [17–21]:

$$E - E_{min} = \frac{s^2 \gamma^{3/2}}{2^{3/2}} \int \left[(y')^2 + (1 - y^2)^2 \right] d\xi. \quad (10)$$

В общем случае функция в правой части уравнения (9) имеет вид двухъямного потенциала. В зависимости от постоянных A и B возможны различные решения уравнения (9). Нас интересуют такие решения, которые обеспечивают конечную плотность энергии. Таким образом, мы ищем решения уравнения (9) в классе ограниченных по величине функций $y(\xi)$ и $y'(\xi)$. Анализ возможных решений уравнения (9), удовлетворяющих этим условиям, показывает, что существует несколько различных решений этого типа.

Одно из них соответствует следующему выбору постоянных: $A = 0$, $B = 1$. Тогда уравнение (9) имеет вид

$$(y')^2 = y^4 - 2y^2 + 1. \quad (11)$$

Решением этого уравнения является функция $y(\xi) = \text{th}(\xi - \xi_0)$. Соответствующая ей функция $\theta(x)$ имеет вид

$$\theta(x) = \theta_0 + \ln \left[\cosh \left(\sqrt{2\gamma} (x - x_0) \right) \right], \quad (12)$$

где θ_0 и x_0 — произвольные постоянные. Конфигурация спинов для уравнения (12) схематично показана на рис. 1, из которого видно, что в левой и правой частях цепочки реализуются две спиральные фазы с разной хиральностью. Переход между этими фазами происходит на относительно коротком участке (толщина доменной стенки).

Как следует из уравнения (12), это решение описывает дефект в однородной спирали — доменную стенку (кинк), разделяющую два домена разной хиральности. Энергия этого возбужденного состояния равна

$$E_{dw} = \frac{s^2}{3} (2\gamma)^{3/2} \approx 0.943 s^2 \gamma^{3/2}. \quad (13)$$

Возбуждения, связанные с образованием хиральных доменных стенок, имеют шель размером $E_{dw} \sim \gamma^{3/2}$, и их вклад в термодинамику экспоненциально мал при $T \ll \gamma^{3/2}$. Однако при $T \sim \gamma^{3/2}$ они

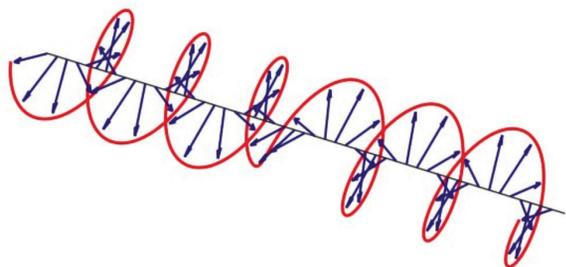


Рис. 1. Схематическая конфигурация спинов для решения типа доменной стенки (кинка) между двумя спиральными фазами с разной хиральностью.

существенно влияют на свойства системы. В частности, они определяют характер фазового перехода из спирального в ферромагнитное состояние.

Интересно рассмотреть влияние возбуждений этого типа на поведение структурного фактора $S(q)$ в зависимости от температуры при $T \sim \gamma^{3/2}$. Как было показано нами ранее в работе [14], структурный фактор $S(q)$ при $T = 0$ имеет δ -образный максимум при $q_{max} = \pm\sqrt{2}\gamma$, указывающий на дальний спиральный порядок, и угол спирали может быть отождествлен с импульсом q_{max} . Но уже при $T > 0$ дальний порядок разрушается тепловыми флуктуациями и δ -пик сглаживается, как показано на рис. 2. При повышении температуры максимум $S(q)$ уменьшается и q_{max} стремится к нулю как $q_{max} \sim \sqrt{T_c - T}$; модель в этом случае переходит из спиральной фазы в ферромагнитную. Такая зависимость подобна поведению параметра порядка в фазовых переходах 2-го рода, роль которого здесь играет величина q_{max} (отметим, однако, что для данной модели речь идет, конечно, о ближнем, а не о дальнем порядке). Этот параметр порядка исчезает при $T = T_c$,

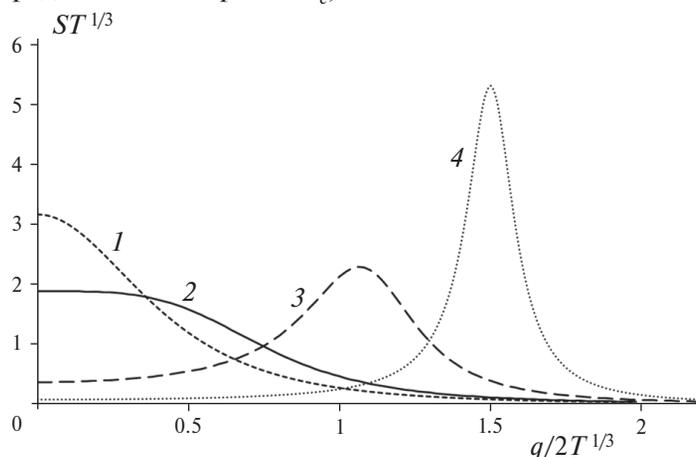


Рис. 2. Статический структурный фактор $S(q)$ для нескольких значений нормализованной температуры $t = T/\gamma^{3/2}$: 1 – $t = 0$, 2 – $t = 1$, 3 – $t = 0.2$, 4 – $t = 0.09$. Положение максимума структурного фактора q_{max} определяет наличие/отсутствие спирального ближнего порядка.

и критическая температура $T_c = E_{dw} \sim \gamma^{3/2}$. Зависимость критической температуры T_c от γ определяет границу Лифшица (рис. 3) на фазовой диаграмме при $\alpha > 1/4$. Отметим, что полученная зависимость энергии возбуждения от γ проявляется и в поведении других термодинамических величин. Например, магнитная восприимчивость как функция температуры имеет максимум при $T \sim E_{dw} \sim \gamma^{3/2}$.

Интересно отметить еще одно аналитическое решение уравнения (9). Оно соответствует случаю, когда $A = 0$, $B < 1$. В этом случае удобно воспользоваться параметризацией постоянной $B = \sin^2(2b)$. Тогда это решение имеет вид

$$y(\xi) = \sqrt{2}(\sin b) \operatorname{sn}(\xi\sqrt{2} \cos b, \operatorname{tg} b). \quad (14)$$

Здесь $\operatorname{sn}(u, k)$ – эллиптическая функция Якоби. Решение (14) позволяет проследить, как осциллирующее решение типа малоамплитудных спиновых волн при малых значениях b трансформируется в периодическую систему кинк–антикинк (рис. 4). Хотя энергии этих конфигураций очень высоки (пропорциональны длине системы), возможность непрерывной трансформации спиновых волн в периодическую систему солитонов вносит ясность в понимание типа возможных возбуждений в системе.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы изучили модель классической гейзенберговской спиновой цепочки с ферромагнитным взаимодействием соседних и антиферромагнитным взаимодействием несоседних спинов. Эта модель используется для качественного описания свойств класса купратов с краевым зацеплением.

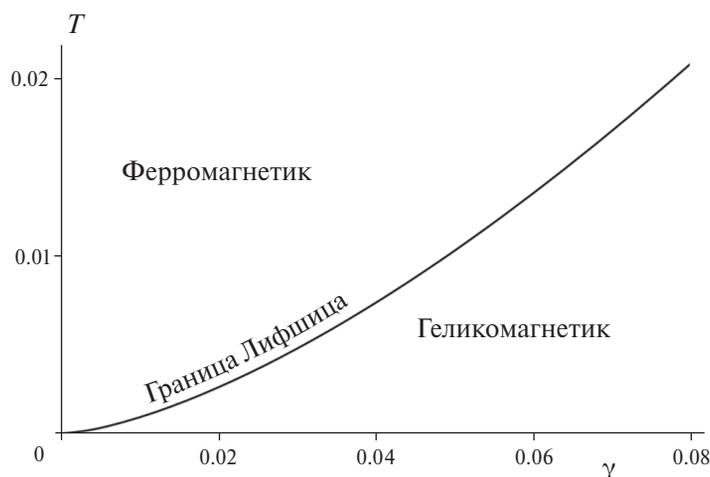


Рис. 3. Фазовая диаграмма модели (1). Граница Лифшица разделяет области с ферромагнитным и спиральным ближним порядком.

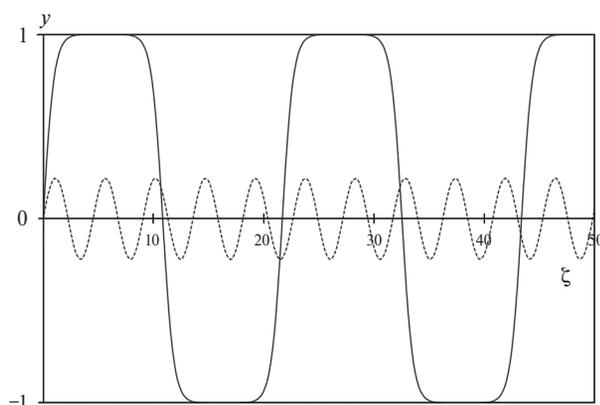


Рис. 4. Решение уравнения Эйлера (11) для двух значений параметра b . Показано, как осциллирующее решение типа малоамплитудных спиновых волн (штриховая линия) трансформируется в периодическую систему кинк–антикинк (сплошная линия).

Свойства рассмотренной модели существенно зависят от параметра фрустрации α – отношения обменных взаимодействий двух типов. Критическое значение $\alpha_c = 1/4$ разделяет ферромагнитную и синглетную (спиральную) фазы основного состояния. Были вычислены энергии щелевых возбужденных состояний спиральной фазы типа доменных стенок (кинков), разделяющих области с противоположной хиральностью. Было показано, что положение максимума структурного фактора стремится к нулю при определенной критической температуре (точке Лифшица) и эта критическая температура определяется энергией возбуждения доменных стенок.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 122041400110-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Diep H.T. Frustrated Spin Systems. Singapore: World Scientific, 2013.
2. Chubukov A.V. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. R4693.
3. Heidrich-Meisner F., Honecker A., Vekua T. // Phys. Rev. B. 2006. V.74. P. 020403.
4. Krivnov V.Ya., Ovchinnikov A.A. // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 6435.
5. Дмитриев Д.В., Кривнов В.Я. // Хим. физика. 2009. Т. 28. № 3. С. 24.
6. Hikiyama T., Kecke L., Momoi T., Furusaki A. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 144404.
7. Дмитриев Д.В., Кривнов В.Я. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 2. С. 1.
8. Sudan J., Lusher A., Lauchli A.M. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 140402.
9. Dmitriev D.V., Krivnov V.Ya. // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. P. 054407.
10. Agripidis C.E., Drechsler S.-L., van den Brink J., Nishimoto S. // Phys. Rev. B. 2017. V. 80. P. 220404.
11. Sato M., Momoi T., Furusaki A. // Phys. Rev. B. 2009. V. 76. P. 060406.
12. Лундин А.А., Зобов В.Е. // Хим. физика. Т. 40. 2021. № 9. С. 41.
13. Takahashi M., Nakamura H., Sachdev S. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. R7446.
14. Dmitriev D.V., Krivnov V.Ya. // Eur. Phys. J. B. 2011. V. 82. P. 123.
15. Лихачев В.Н., Виноградов Г.А. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 3. С. 38.
16. Лихачев В.Н., Виноградов Г.А., Эрихман Н.С. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 6. С. 3.
17. Cahn J.W., Hilliard J.E. // J. Chem. Phys. 1958. V. 28. № 2. P. 258.
18. Луцкина С.В., Немухин А.В., Поляков И.В. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 2. С. 34.
19. Лебедь И.В. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 4. С. 81.
20. Лебедь И.В. // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 9. С. 83.
21. Волохов В.М., Полянов Л.В., Лебедь И.В. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 10. С. 3.

DOMAIN-WALL EXCITATIONS IN HELICAL PHASE OF SPIN CHAIN WITH COMPETING EXCHANGE INTERACTIONS

V. Ya. Krivnov^{1*}, D. V. Dmitriev¹

¹*Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

**E-mail: krivnov@deom.chph.ras.ru*

The classical Heisenberg spin chain with competing exchange interactions of ferro-(F) and antiferromagnetic (AF) types has been considered. This model describes qualitatively properties of the edge-sharing cuprates. The model is characterized by the frustration parameter which is a ratio of the AF- and F-interactions. The ground state of the model is either ferromagnetic or singlet with helical spin correlations in dependence of the frustration parameter. The main attention is given to the study of excited states in the helical phase. These states are domain walls separating the regions with opposite chiralities. It is shown that these excitations are gapped and their energy scales the temperature region in which the phase transition from the helical to the ferromagnetic phase takes place. The calculated energies of domain-walls excitations are used for the determination of the Lifshitz boundary on the phase diagram.

Keywords: frustrated spin chain, edge-shared cuprates, chiral domain wall, Lifshitz boundary.

REFERENCES

1. H.T. Diep. *Frustrated Spin Systems* (Singapore: World Scientific), 2013.
2. A.V. Chubukov. *Phys. Rev. B*, **44**, 4693(R) (1991).
3. F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, T. Vekua. *Phys. Rev. B*, **74**, 020403 (2006).
4. V.Ya. Krivnov, A.A. Ovchinnikov. *Phys. Rev. B*, **53**, 6435 (1996).
5. D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **3**, 280 (2009).
6. T. Hikihara, L. Kecke, T. Momoi, A. Furusaki. *Phys. Rev. B*, **78**, 144404 (2008).
7. D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **15**, 89 (2021).
8. J. Sudan, A. Lusher, A.M. Lauchli. *Phys. Rev. B*, **80**, 140402 (2009).
9. D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov. *Phys. Rev. B*, **82**, 054407 (2010).
10. C.E. Agripidis, S.-L. Drechsler, J. van den Brink, S. Nishimoto. *Phys. Rev. B*, **80**, 220404 (2017).
11. M. Sato, T. Momoi, A. Furusaki. *Phys. Rev. B*, **76**, 060406 (2009).
12. A.A. Lundin, V.E. Zobov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **15**, 839 (2021).
13. M. Takahashi, H. Nakamura, S. Sachdev. *Phys. Rev. B*, **54**, 7446 (R) (1996).
14. D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov. *Eur. Phys. J. B*, **82**, 123 (2011).
15. V.N. Likhachev, G.A. Vinogradov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **14**, 222 (2020).
16. V.N. Likhachev, G.A. Vinogradov, N.S. Erikhman. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **14**, 391 (2020).
17. J.W. Cahn, J.E. Hilliard. *J. Chem. Phys.*, **28**, 258 (1958).
18. S.V. Lushchekina, A.V. Nemukhin, I.V. Polyakov et al. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **16**, 103 (2022).
19. I.V. Lebed. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **16**, 197 (2022).
20. I.V. Lebed. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **16**, 370 (2022).
21. V.M. Volokhov, L.V. Poluyanov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **16**, 827 (2022).