

С 36

В-794

6/11-70

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 4933



Во Хонг Ань

К УСТОЙЧИВОСТИ
АНГАРМОНИЧЕСКОГО КРИСТАЛЛА

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4 - 4933

Во Хонг Ань

К УСТОЙЧИВОСТИ
АНГАРМОНИЧЕСКОГО КРИСТАЛЛА

8237/2
49.

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ЦЕНТРАЛЬНЫЙ
КАБИНЕТ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЙ
БИБЛИОТЕКА

1. Введение. Основные уравнения

Для учёта влияния ангармонических членов в разложении потенциальной энергии на динамику решетки, которое значительно при большой энергии нулевых колебаний или при температурах, близких к температуре плавления, М. Борном в 1951 г./1/ был предложен метод, в котором ангармонические колебательные движения атомов решетки рассматривались как совокупность гармонических осцилляторов с перенормированными частотами, определенными самосогласованным образом. Этот метод в дальнейшем получил применение и обоснование в ряде работ/2,3/.

В работе/4/ был предложен метод самосогласованного учёта ангармонизмов высших порядков, основанный на применении двухвременных функций Грина. В работах/5,6/ этот метод был применен для изучения условий устойчивости ангармонической линейной цепочки и трехмерной решетки в псевдогармоническом приближении.

В псевдогармонической теории спектр частот колебаний решетки определяется с учётом всех четных порядков ангармонизма в то время как нечётные порядки опускаются. С другой стороны, так как относительные среднеквадратичные смещения атомов в решетке $\sqrt{\frac{\overline{u^2}}{l^2}}$ достаточно малы вплоть до критической температуры, представляется возможным и целесообразным учитывать лишь первые члены в разложении самосогласованного потенциала и таким образом в определенном смысле уменьшить нежелательный эффект искажения за счёт опускания нечётных ангармонизмов. Это позволяет значительно упростить расчёты и проводить исследование свойств ангармонического кристалла в широком интервале

температур и внешнего давления, определить условия его устойчивости с использованием более реалистического потенциала в виде Ленарда-Джонса вместо других модельных потенциалов, а также сделать, где это возможно, количественные оценки величин.

В настоящей работе условия устойчивости ангармонического кристалла рассматриваются в псевдогармоническом приближении с учётом ангармонических членов 3-го и 4-го порядков. По аналогии с^{6/} определяются критические параметры и исследуется поведение термодинамических величин вблизи критической точки. Задача решается с использованием потенциала парного взаимодействия Морзе и Ленарда-Джонса (12-6), и результаты сравниваются. Выявляется также вклад младших производных от потенциала взаимодействия.

Исследование проводится на основе самосогласованной системы уравнений в псевдогармоническом приближении^{6/} для простой решетки с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell} \frac{\vec{P}_{\ell}^2}{2M} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) + H_1, \quad (1)$$

где N - число атомов в решетке, M - масса атома, \vec{P}_{ℓ} , \vec{R}_{ℓ} - операторы импульса и координаты атома в узле ℓ , $H_1 = \sum_{\alpha} F_{\ell}^{\alpha} R_{\ell}^{\alpha}$ - гамильтониан внешних сил.

В случае парных сил взаимодействия между атомами

$$U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\ell, m} \phi(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_m) \quad (2)$$

все уравнения значительно упрощаются. Для частоты колебаний атомов уравнение принимает вид:

$$M \epsilon_{kj}^2 e_{kj}^{\alpha} = \sum_{\ell} (1 - e^{i\vec{k}\ell}) e_{kj}^{\beta} \frac{\partial^2}{\partial \ell_{\alpha}^2 \partial \ell_{\beta}^2} \tilde{\phi}(\vec{\ell}), \quad (3)$$

где самосогласованный потенциал парных сил $\tilde{\phi}(\vec{\ell} - \vec{m}) = \langle \phi(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_m) \rangle$ в псевдогармоническом приближении может быть записан в виде ($m = 0$)

$$\tilde{\phi}(\vec{\ell}) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \langle (u_{\ell} - u_0)^{\alpha} (u_{\ell} - u_0)^{\beta} \rangle \frac{\partial^2}{\partial \ell_{\alpha}^2 \partial \ell_{\beta}^2} \right\} \phi(\vec{\ell}), \quad (4)$$

а в предполагаемом в данной работе приближении низших ангармонизмов - в виде

$$\tilde{\phi}(\vec{l}) = \phi(\vec{l}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \langle (u_{\vec{l}-u_0})^\alpha (u_{\vec{l}-u_0})^\beta \rangle \frac{\partial^2 \phi(\vec{l})}{\partial l_\alpha \partial l_\beta}. \quad (5)$$

Как видно, $\tilde{\phi}(\vec{l})$ зависит лишь от корреляционной функции смещений двух атомов, которая определяется через функции Грина согласно спектральной теореме/7/ и имеет вид

$$\langle u_{\vec{l}}^\alpha u_{\vec{l}'}^\beta \rangle = \frac{1}{MN} \sum_{\vec{k}j} \frac{e_{\vec{k}j}^\alpha e_{\vec{k}j}^\beta}{2\epsilon_{\vec{k}j}} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{l}')} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_{\vec{k}j}}{2T}. \quad (6)$$

Равновесное расстояние между атомами ℓ в случае изотропного внешнего давления P определяется из уравнения

$$P = - \frac{1}{6v} \sum_{\vec{l}} \ell \tilde{\phi}'(\vec{l}), \quad (7)$$

где v - объем кристалла, приходящийся на один атом. Выражение для внутренней энергии E имеет вид:

$$E = \langle \mathcal{H} - N_1 \rangle = \sum_{\vec{k}j} \frac{\epsilon_{\vec{k}j}}{4} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_{\vec{k}j}}{2T} + \frac{N}{2} \sum_{\vec{l}} \tilde{\phi}(\vec{l}). \quad (8)$$

2. Условия устойчивости с учётом низших ангармонизмов

Мы рассматриваем здесь гранецентрированную кубическую решетку с взаимодействием ближайших соседей. При вычислении производных потенциала, в отличие от/6,8/, не будем пользоваться приближением старших производных:

$$\nabla_{\alpha_1} \nabla_{\beta_1} \dots \nabla_{\alpha_n} \nabla_{\beta_n} \approx \frac{\ell_{\alpha_1} \ell_{\beta_1}}{\ell^2} \dots \frac{\ell_{\alpha_n} \ell_{\beta_n}}{\ell^2} \nabla_{\vec{l}}^{(2n)} \quad (*)$$

а будем учитывать и младшие члены. Тогда формула (5) дает для самосогласованного потенциала взаимодействия атомов решетки выражение, в которое входит не только продольное средне-квадратичное смещение $\sqrt{\bar{u}_\rho^2}$, но и поперечное $-\sqrt{\bar{u}_t^2}$:

$$\bar{\phi}(\vec{l}) = \phi(\vec{l}) + \frac{1}{2} \bar{u}_\rho^2 \phi''(\vec{l}) + \frac{1}{2} \bar{u}_t^2 \frac{1}{l} \phi'(\vec{l}), \quad (9)$$

где для корреляционных функций смещений атомов имеем

$$\bar{u}_\rho^2(l) = \frac{\langle (\vec{l} \times (\vec{u}_\rho - \vec{u}_0))^2 \rangle}{l^2} = \frac{1}{MN} \sum_{\vec{k}_j} \frac{(\vec{l} \cdot \vec{e}_{\vec{k}_j})^2}{l^2 \epsilon_{\vec{k}_j}} (1 - e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{l}}) \operatorname{cth} \frac{\epsilon_{\vec{k}_j}}{2T}, \quad (10)$$

$$\bar{u}_t^2(l) = \frac{\langle [\vec{l} \times (\vec{u}_t - \vec{u}_0)]^2 \rangle}{l^2} = \frac{1}{MN} \sum_{\substack{\vec{k}_j \\ \alpha\beta}} (\delta_{\alpha\beta} - \frac{l_\alpha l_\beta}{l^2}) \frac{e_{\vec{k}_j}^\alpha e_{\vec{k}_j}^\beta}{\epsilon_{\vec{k}_j}} (1 - e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{l}}) \operatorname{cth} \frac{\epsilon_{\vec{k}_j}}{2T} \quad (11)$$

Уравнение (3) для определения частоты $\epsilon_{\vec{k}_j}$ принимает вид

$$M \epsilon_{\vec{k}_j}^2 = \sum_{\alpha\beta} (1 - e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{l}}) e_{\vec{k}_j}^\alpha e_{\vec{k}_j}^\beta \left\{ \frac{l_\alpha l_\beta}{l^2} \bar{\phi}(\vec{l}) + (\delta_{\alpha\beta} - \frac{l_\alpha l_\beta}{l^2}) \frac{\phi'(\vec{l})}{l} \right\}. \quad (12)$$

Для упрощения вычислений принимаем следующее приближение для частоты в гармоническом приближении $\omega_{\vec{k}_j}^2$:

$$\omega_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{3} \sum_j \omega_{\vec{k}_j}^2 = \frac{f}{3M} \sum_j (1 - e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{l}}) \approx \delta \omega_{\vec{k}_j}^2, \quad (13)$$

где δ - численный коэффициент порядка единицы. Оценка средней величины $\frac{\omega_{\vec{k}}^2}{\omega_{\vec{k}_j}^2}$ с использованием данных [8] по 6 направлениям обратной решетки при малых значениях волнового вектора \vec{k} дает $\delta \approx 1,4$.

С использованием такого приближения из (10)-(12) получаем следующее уравнение для определения \bar{u}_ρ^2 , \bar{u}_t^2 :

$$z f \bar{a}^2 \bar{u}_\rho^2 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_j} \epsilon_{\vec{k}_j} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_{\vec{k}_j}}{2T}, \quad \bar{u}_t^2 = g \bar{u}_\rho^2, \quad (14)$$

где $g = 3\delta - 1 \approx 3$,

$$\alpha^2 = \frac{\epsilon^2 \kappa_i^2}{\omega^2 \kappa_i} = \frac{\phi''(\ell)}{f} + g \frac{\phi'(\ell)}{\ell f}, \quad f = \phi'(r_0), \quad (15)$$

(r_0 - равновесное расстояние между ближайшими соседями в гармоническом приближении).

Решения уравнений (7) и (14) будем определять с использованием парных потенциалов Морзе:

$$\phi_M(\ell) = D [(e^{-a(\ell-r_0)} - 1)^2 - 1] \quad (16)$$

и Ленарда-Джонса:

$$\phi_{L-J}(\ell) = D [(\frac{r_0}{\ell})^{12} - 2(\frac{r_0}{\ell})^6] \quad (17)$$

(D - глубина потенциальной ямы), которые с учётом (9) дают

$$\phi_M^{\approx}(\ell) = D e^{-a(\ell-r_0)} \{ (e^{-a(\ell-r_0)} - 2) + y [(2e^{-a(\ell-r_0)} - 1) - \frac{g}{a\ell} (e^{-a(\ell-r_0)} - 1)] \}, \quad (18)$$

$$\phi_{L-J}^{\approx}(\ell) = D \{ (\frac{r_0}{\ell})^{12} - 2(\frac{r_0}{\ell})^6 + \frac{1}{6} y [(13-g)(\frac{r_0}{\ell})^{14} - (7-g)(\frac{r_0}{\ell})^8] \}, \quad (19)$$

где $y = a^2 \bar{u}^2$ (в случае потенциала (17), (19) следует положить $a = 6/r_0$). Эти выражения позволяют определить равновесное расстояние ℓ между ближайшими атомами, коэффициент перенормировки $\bar{\alpha}^2$ и внутреннюю энергию E как функции безразмерной переменной y . В случае малого изотропного давления имеем с точностью до членов первого порядка по y

$$\ell_i = \ell_{0i} - \frac{\sigma_i}{18} p_i r_0, \quad \ell_{0i} = r_0 (1 + \frac{\sigma_i}{4} \gamma_i y_i), \quad (20)$$

$$\bar{\alpha}_i^2 = 1 - \Delta_i y_i + \gamma_i p_i, \quad (21)$$

$$\left(\frac{E}{N}\right)_i = -\frac{zD}{2} \{ 1 - [2 + (1 + \delta_{i2}) \gamma_i p_i] y_i \}, \quad (22)$$

где индекс $i = 1, 2$ соответствует потенциалам (18), (19), а коэффициенты имеют следующие значения:

$$\sigma = \begin{matrix} \frac{6}{ar_0}, & i=1 \\ 1, & i=2 \end{matrix}; \quad \gamma = \begin{matrix} 1 - \frac{g}{3ar_0}, & i=1 \\ \frac{21-g}{18}, & i=2 \end{matrix}; \quad \Delta = \begin{matrix} 1 + \frac{g}{(ar_0)^2}, & i=1 \\ \frac{35+g}{36}, & i=2 \end{matrix}; \quad (23)$$

$$p_i = P \left(\frac{108 v_{0i}}{\sigma_i^2 f_i \ell_{0i} z r_0} \right) < 1 - \text{малое безразмерное давление, } z = 12, \quad v_{0i} = \frac{\ell_{0i}^3}{\sqrt{z}},$$

ℓ_{0i} - равновесное расстояние при $P = 0$.

Ниже рассматривается решение (14) в предельных случаях высоких и низких температур.

а) Высокие температуры, $T \gg \omega_L$, $\omega_L = \sqrt{\frac{8f}{M}}$ - максимальная частота в гармоническом приближении /8/.

В этом случае получаем из (14) и (21), как и в /6/, следующее уравнение для y_i :

$$\lambda_i^1 \overset{\approx 2}{a_i^2} y_i = 1 + \overset{\approx 2}{a_i} \beta_i, \quad (24)$$

$$\lambda_i^1 = \frac{zD}{3T} = \frac{M \omega_{Li}^2 r_0^2}{144T} \sigma_i^2, \quad \beta_i = \frac{\omega_{Li}^2}{24T^2} \ll 1.$$

Это уравнение имеет действительное решение при $T \leq T_{ci}$,

$$T_{ci} = \frac{D}{\Delta_i} (1 + 2\gamma_i p_i - 0,5 \beta_{ci}). \quad (25)$$

При $T \lesssim T_{ci}$ интересующие нас величины имеют вид

$$y_i \approx \frac{1}{2\Delta_i} \left[1 + \gamma_i p_i + \frac{1}{4} \beta_{ci} \frac{T}{T_{ci}} - (1 + \gamma_i p_i) \sqrt{1 - \frac{T}{T_{ci}}} \right], \quad (26)$$

$$\epsilon_{k,j,i}^2 \approx \frac{1}{2} \omega_{k,j,i}^2 \left[1 + \gamma_i p_i - \frac{1}{4} \beta_{ci} \frac{T}{T_{ci}} + (1 + \gamma_i p_i) \sqrt{1 - \frac{T}{T_{ci}}} \right], \quad (27)$$

$$\left(\frac{E}{N}\right)_i = -3 T_{ci} \left[0,5 \beta_{ci} \left(1 - \frac{T}{T_{ci}}\right) + 2 \sqrt{1 - \frac{T}{T_{ci}}} \right], \quad (28)$$

$$\ell_i \approx r_0 \left\{ 1 + \sigma_i \frac{\gamma_i}{8 \Delta_i} \left[1 + \left(\gamma_i - \frac{4 \Delta_i}{9 \gamma_i}\right) p_i + \frac{1}{4} \beta_{ci} \frac{T}{T_{ci}} - (1 + \gamma_i p_i) \sqrt{1 - \frac{T}{T_{ci}}} \right] \right\},$$

$$\alpha_{Ti} \approx \sigma_i \frac{\gamma_i}{\Delta_i} \left(\frac{k r_0}{16 \ell_i T_{ci}} \right) \left(1 - \frac{T}{T_{ci}} \right)^{-1/2}, \quad (30)$$

$$c_{pi} \approx 3k \left(1 - \frac{T}{T_{ci}} \right)^{-1/2}. \quad (31)$$

Здесь α_T - коэффициент линейного расширения, c_p - теплоемкость при постоянном давлении.

Из полученных выражений видно, что при $T > T_{ci}$ частота колебаний становится комплексной, что означает динамическую неустойчивость системы. Среднее расстояние между атомами и внутренняя энергия остаются конечными при $T \leq T_{ci}$, а коэффициент линейного расширения и теплоемкость при $p_i = \text{const}$ ограниченно возрастают при $T \rightarrow T_{ci}$. Оценка относительных продольных смещений атомов дает ($\text{ar}_0 \approx 6$ для $i=1$)

$$\frac{\sqrt{u^2}}{\ell_{ci}} \approx \frac{1}{6 \sqrt{2 \Delta_i} \left(1 + \frac{\gamma_i}{8 \Delta_i} \right)} \approx \begin{matrix} 0,11, & i=1, \\ 0,10, & i=2, \end{matrix}$$

что говорит о справедливости приближения (5).

б) Низкие температуры, $T \ll \omega_i$, Приближенное интегрирование (14) с учетом (21) дает для y_i уравнение

$$\lambda_i \tilde{\alpha}_i^2 y_i = \tilde{a}_i + \eta_i \tilde{\alpha}_i^{-3}, \quad \eta_i = \frac{3\pi^4 T^4}{5 \omega_{pi}^4} \ll 1, \quad (32)$$

$\lambda_i = \frac{zD}{\epsilon_{0i}}$, $\epsilon_{0i} \approx 1,02 \omega_{Li}$ - энергия нулевых колебаний, $\omega_{Di} \approx 1,05 \omega_{Li}$ - дебаевская энергия в гармоническом приближении. Действительное решение (32) существует при $\lambda_i \geq \lambda_{0i}$ и $T \leq T_{ci}$,

$$T_{ci} = \frac{\omega_{Di}}{3\pi} \left(\frac{10}{\Delta_i \sqrt{3}} \right)^{1/4} (1 + 2\gamma_i p_i) (\lambda_i - \lambda_{0i})^{1/4} \approx 0,17 \frac{\epsilon_{0i}}{\Delta_i^{1/4}} (\lambda_i - \lambda_{0i})^{1/4} \quad (33)$$

$$\lambda_{0i} = 2,6 \Delta_i (1 - 1,5 \gamma_i p_i) .$$

Вблизи критической точки ($T \lesssim T_{ci}$) имеем

$$y_i \approx \frac{2}{3\Delta_i} [1 + \gamma_i p_i - 12\eta_{ci} - 3\sqrt{\frac{2}{3}} \eta_{ci} (1 - \frac{T^4}{T_{ci}^4})] , \quad (34)$$

$$\epsilon_{k,i} \approx \frac{1}{3} \omega_{k,i} [1 + \gamma_i p_i + 24\eta_{ci} + 6\sqrt{\frac{2}{3}} \eta_{ci} (1 - \frac{T^4}{T_{ci}^4})] , \quad (35)$$

$$\left(\frac{E}{N} \right)_i \approx 0,43 \epsilon_{0i} [(4 - 3\Delta_i) - (4 + 9\Delta_i) 3\eta_{ci} - 12\sqrt{\frac{2}{3}} \eta_{ci} (1 - \frac{T^4}{T_{ci}^4})] , \quad (36)$$

$$\ell_i \approx r_0 \left\{ 1 + \sigma_i \frac{\gamma_i}{6\Delta_i} \left[1 + \left(\gamma_i - \frac{\Delta_i}{3\gamma_i} \right) p_i - 12\eta_{ci} - 3\sqrt{\frac{2}{3}} \eta_{ci} \left(1 - \frac{T^4}{T_{ci}^4} \right) \right] \right\} , \quad (37)$$

$$a_{Ti} \approx \sigma_i \frac{\gamma_i}{\Delta_i} \left(\frac{kr_0 T^3}{\ell_i T_{ci}^4} \right) \left[\frac{2\eta_{ci}}{3(1 - \frac{T^4}{T_{ci}^4})} \right]^{1/2} , \quad (38)$$

$$c_{pi} \approx \frac{6k\epsilon_{0i} T^3}{T_{ci}^4} \left(\frac{2\eta_{ci}}{1 - \frac{T^4}{T_{ci}^4}} \right)^{1/2} . \quad (39)$$

В этом случае динамическая неустойчивость системы наступает при $T > T_{ci}$, или $\lambda_i < \lambda_{0i}$, так что λ_{0i} есть минимальное значение параметра связи для устойчивой решетки. Как и в случае а), величины a_{Ti} и c_{pi} неограниченно возрастают при $T \rightarrow T_{ci}$, а E_i и ℓ_i при $T < T_{ci}$ и $\lambda_i > \lambda_{0i}$ остаются конечными. Относительные смещения также малы

$$\frac{\sqrt{u-2}}{\ell_{ci}} \approx \frac{1}{6\sqrt{1,5\Delta_i} \left(1 + \frac{\gamma_i}{6\Delta_i} \right)} \approx \begin{matrix} 0,12, & i = 1, \\ 0,11, & i = 2. \end{matrix}$$

Для сравнения с кривыми плавления ^{10/} вводим приведенное давление

$$P^* = P \frac{r_0^3}{D\sqrt{2}} \approx 6p \text{ и запишем (25) и (33) в виде}$$

$$T_{c1} = \frac{D}{\Delta_i} (1 + 0,3\gamma_i P_i^* - 0,5\beta_{c1}^f), \quad T \gg \omega_{L1}, \quad (40)$$

$$T_{c1} = 0,15 \epsilon_{0i} \gamma_i^{1/4} (P_i^* - P_{0i}^*)^{1/4}, \quad T \ll \omega_{L1}, \quad (41)$$

$$P_{0i}^* = \frac{1}{\gamma_i} (4 - 18,5 \frac{D}{\Delta_i \epsilon_{0i}}).$$

Эти формулы указывают на близость критической точки к точке плавления (см./9/). Отметим также, что подобный результат был получен ранее в/11,12/ в рамках квазигармонического приближения, в котором учитывается тепловое расширение решетки, но не принимаются во внимание поправки к энергии за счёт ангармонических членов.

Из выражений (25), (33), соответствующих потенциалу Ленарда-Джонса ($i = 2$), можно заключить, что неустойчивость ангармонической решетки наступает при $T > 0,16 u$ ($T \gg \omega_L$) или $\epsilon_0 > 0,7 u$ ($T \ll \omega_L$), где

$$u = \frac{zD}{2}.$$

Результаты в случае использования приближения (*) сразу получаются, если во всех формулах положить $g = 0$, тогда вместо (23) имеем:

$$\gamma_i = \begin{matrix} 1, & i=1, \\ 7/6, & i=2. \end{matrix} \quad \Delta_i = \begin{matrix} 1, & i=1, \\ 35/36, & i=2. \end{matrix} \quad (42)$$

Таким образом, сравнивая полученные результаты с результатами работы/6/, видим, что учёт только низших членов ангармонизма в псевдогармонической теории приводит к уменьшению значения критической температуры T_c ($T \gg \omega_L$) и увеличению значения критического параметра связи λ_0 ($T \ll \omega_L$) (для потенциала Морзе T_c уменьшается в $\approx 1,5$ раза, а λ_0 увеличивается в $\approx 1,9$ раз), т.е. к эффекту, подобному учёту влияния затухания за счёт нечётных ангармонизмов/9/.

Учёт младших членов при вычислении производных потенциала приводит к дальнейшему уменьшению T_c и увеличению λ_0 (в Δ_1 раз, соответственно, см. (23)). Поправки, внесенные изменением вида парного потенциала при использовании (5), весьма незначительны (см. (23), (42)).

Резюмируя, можно сказать, что учёт всех указанных факторов приводит к уточнению значения критических параметров и термодинамических величин ангармонического кристалла вблизи критической точки, что улучшает физическое описание реального кристалла.

В дальнейшем предполагается провести рассмотрение условий устойчивости с учётом нечётных ангармонических членов в разложении самосогласованного потенциала решетки.

В заключение автор выражает искреннюю благодарность Н.М. Плакиде за предложение темы этой работы и многократные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

1. M. Born. *Festschrift Acad. Wiss. Göttingen Math. Phys. Kl.*, 1, (1951).
2. D.J. Hooton. *Phil. Mag.*, (7), 46, 422, 433 (1955); (8), 3, 49 (1958).
3. N.S. Gillis, N.R. Werthamer, T.R. Koehler. *Phys. Rev.*, 165, 951 (1968).
4. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. *Acta Phys. Hung.*, 25, 17 (1968).
5. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. *Phys. Lett.*, 26A, 342 (1968).
6. Н.М. Плакида. *ФТТ*, 11, (В. 3), 700 (1969).
7. Д.Н. Зубарев. *УФН*, 78, 71 (1960).
8. A.A. Maradudin, P.A. Flinn, R.A. Coldwell-Horsfall. *Ann. Phys.*, (N.Y.) 15, 337, 360 (1961); P.A. Flinn, A.A. Maradudin. *Ann. Phys.*, (N.Y.) 22, 223 (1963).
9. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. Препринт ОИЯИ, Р4-4575, Дубна 1969.
10. A. Michels, C. Prins. *Physica* 28, 101 (1962).
11. M. Born. *J. Chem. Phys.*, 7, 591 (1939).
12. И.П. Базаров. *ФТТ*, 11, 840 (1969).

Рукопись поступила в издательский отдел
19 февраля 1970 года.

Во Хонг Ань

P4-4933

К устойчивости ангармонического кристалла

Рассматриваются условия устойчивости ангармонического кристалла в псевдогармонической теории при учёте членов ангармонизма 3-го и 4-го порядков. Обсуждаются результаты в случае использования потенциала Ленарда-Джонса.

Сообщения Объединенного института ядерных исследований

Дубна, 1970

Wo Khoang An

P4-4933

On the Stability of the Anharmonic Crystal

The conditions, under which the anharmonic crystal is stable, are considered in the pseudoharmonic theory taking into account the anharmonicity terms of the third and the fourth orders. The results obtained for the case, when the Lenard-Johns potential is used, are discussed.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.

Dubna, 1970