ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 11856

С.Стаменкович, Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов,
Т.Шиклош

ТУННЕЛИРОВАНИЕ И ФОНОНЫ В ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

1978

P17 - 11856

С.Стаменкович[1], Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов,

Т.Шиклош[2]

ТУННЕЛИРОВАНИЕ И ФОНОНЫ В ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Направлено на Всесоюзный семинар по сегнетоэлектрикам /Калинин, 1978/.

[1] Институт ядерных исследований им. Б.Кидрича, СФРЮ.

[2] ЦИФИ ВАН, Будапешт.

Стаменкович С. и др. P17 - 11856

Туннелирование и фононы в динамической модели фазового перехода

В рамках обобщенной модели структурного фазового перехода, ранее предложенной авторами, развита схема последовательного учета двух типов возбуждений в системе связанных сильноангармонических осцилляторов: возбуждений, обусловленных туннелированием атомов относительно положений равновесия, и высоколежащих фононных возбуждений. На основе вариационного принципа для свободной энергии получен эффективный гамильтониан, в котором оба типа возбуждений связаны самосогласованным образом. В случае одночастичного потенциала с двумя минимумами получены оценки параметров фазового перехода в двух предельных случаях перехода: типа порядок-беспорядок и типа смещение.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Stamenkovic S. et al. P17 - 11856

Tunneling Effects and Phonons in the Structural Phase Transition

A dynamical model for the structural phase transition is proposed. The effects of tunneling active in the transition atoms are considered taking into account higher energy excitations of phonon type. By applying the variational method the effective Hamiltonian is obtained where the tunneling effects are described in the pseudo-spin representation by De Gennes Hamiltonian with parameters depending on the phonon subsystem. In the limiting cases of strong and weak coupling the phase transitions in the model are displacive or of order-disorder types, respectively.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nucleor Research. Dubna 1978

1. ВВЕДЕНИЕ

Динамика структурных /в том числе сегнетоэлектрических/фазовых переходов обычно описывается при помощи критической моды колебаний, определяющей движение активной при данном фазовом переходе группы атомов. При этом принято разделять переходы типа "смещение", обусловленные динамической неустойчивостью решетки относительно критической моды - мягких фононов, и переходы типа "порядок - беспорядок", связанные со статистическим разупорядочением активной группы атомов, с критической модой диффузионного типа /см., например,/1/ /. Однако в недавних исследованиях на простых моделях было показано, что в динамике структурного фазового перехода существенную роль играют оба типа возбуждений, которые проявляются в каждом типе фазового перехода /см., например,/2/ и цитированную там литературу/. При этом движение атомов в ангармонической решетке может быть представлено в виде быстрых осцилляций фононного типа и относительно редких перескоков между несколькими /в простейшем случае - двумя/ равновесными положениями. Чтобы учесть оба типа возбуждений - фононы и конфигурационное разупорядочение - в нашей работе/3/ была предложена обобщенная модель сегнетоэлектрического фазового перехода, в которой координаты активных атомов записывались в виде:

$$s_i = \sum_{\alpha} \sigma_i \, (b_i^{\alpha} + u_i^{\alpha}), \qquad /1/$$

где проекционный оператор σ_i^{α} определяет, в каком положении равновесия b_i^α совершаются колебания атомов u_i^α в узле решетки i. В случае двух равновесных положений $(\alpha = +1, -1)$ проекционный оператор $\sigma_i^+ = 1-\sigma_i^- = \frac{1}{2}(1+\sigma_i^Z)$, где $\sigma_i^Z = \pm 1$. Представление /1/ является естественным обобщением общепринятого определения координат атомов в кристаллической решетке как суммы их равновесных положений /определяющих узлы решетки/ и динамических смещений u_i /статистическое среднее $\langle u_i \rangle = 0$ / на тот случай, когда имеется несколько /например, два: $\alpha = \pm 1$ / эквивалентных положений равновесия в одной элементарной ячейке. В работах[3,4] был исследован фазовый переход для простой модели решетки /см.[5] / с однокомпонентным параметром порядка, и было показано, что возможен фазовый переход смешанного типа, когда наряду с неустойчивостью решетки относительно фононных возбуждений возникает конфигурационное разупорядочение, определяемое псевдоспиновой переменной $\sigma^\alpha = \langle \sigma_i^\alpha \rangle$ /или $\sigma = \langle \sigma_i^Z \rangle$ /.

Введение проекционного оператора σ_i^α в /1/ не позволило, однако, учесть в[3] эффекты туннелирования атомов относительно равновесных положений, вследствие чего псевдоспиновая подсистема описывалась в статическом приближении в рамках модели Изинга. В то же время хорошо известно, что эффекты туннелирования приводят к появлению коллективных возбуждений в псевдоспиновой подсистеме, которые, в свою очередь, могут носить характер мягкой моды /см., например,[1] /. Характерная энергия этих возбуждений - порядка энергии расщепления $\hbar\Omega$ основного состояния при учете туннелирования и обычно много меньше характерной энергии возбуждений фононного типа: $\hbar\omega_0$: $\hbar\Omega \ll \hbar\omega_0$. Поэтому роль этих низколежащих возбуждений может быть определяющей в области низких температур, $kT \sim \hbar\Omega$. При этом более высоколежащие возбуждения фононного типа помимо перенормировки параметров псевдоспиновой подсистемы могут определять в области более высоких температур и переход типа "смещение", обусловленный мягкой фононной модой.

Целью настоящей работы является последовательный учет обоих типов возбуждений - связанных с туннелированием атомов относительно равновесных положений и высоколежащих фононных возбуждений, в рамках обобщенной модели, сформулированной в[3]. Качественно этот вопрос обсуждался нами ранее в[6]. В следующем разделе 2 выводится гамильтониан модели, фазовый переход в которой на основе вариационного подхода рассмотрен в разделе 3. Обсуждение полученных результатов приведено в разделе 4.

2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ

При модельном описании динамики решетки ангармонического кристалла удобно воспользоваться методом локальных нормальных координат[7,8], который позволяет выделить критическую моду колебаний и записать гамильтониан в простом виде:

$$H = \sum_i \left\{ \frac{P_i^2}{2m} + U(s_i) \right\} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(s_i, s_j), \qquad /2/$$

где локальная нормальная координата s_i описывает смещение всех атомов в i -й элементарной ячейке для критической в данном фазовом переходе моды колебаний; p_i - сопряженный ей импульс и m - приведенная масса. Одночастичный $U(s_i)$ и парный $V(s_i, s_j)$ потенциалы определяют в модельном виде динамику критических колебаний. Пренебрегая возможным вырождением нормальной моды, будем считать s_i однокомпонентной переменной.

Учитывая физическую картину движения атомов при структурном фазовом переходе, описанную выше, представим координату s_i в виде:

$$s_i = r_i + u_i, \qquad /3/$$

где r_i соответствует положению равновесия, которое может меняться вследствие туннелирования с малой частотой Ω, а u_i описывает быстрые осцилляции фононного типа с характерной частотой $\omega_0 \gg \Omega$. Представление

/1/ является частным случаем /3/ при $r_i = \sum_\alpha \sigma_i^\alpha b_i^\alpha$. Возникающее в /3/ удвоение числа независимых переменных характерно при описании динамики реальной решетки, в котором помимо малых колебаний атомов - коллективных возбуждений учитываются еще возбуждения одночастичного типа, ответственные за появление вакансий, переходы атомов в междоузлия и т.д. Заметим, что подобное /3/ представление оказалось весьма успешным при описании диффузии и коллективных возбуждений в жидкости /см., например,[9] /. Подставляя теперь /3/ в /2/, получаем гамильтониан от "конфигурационных" r_i и "фононных" u_i переменных. Чтобы разделить эти переменные, воспользуемся вариационным подходом[4], аппроксимируя полный гамильтониан системы суммой независимых гамильтонианов для фононной и конфигурационной подсистем:

$$H_o = H_{ph} + H_s . \qquad /4/$$

Учитывая, что фононная подсистема описывает малые колебания атомов относительно некоторых эффективных положений равновесия, выберем пробный гамильтониан для нее в псевдогармоническом виде:

$$H_{ph} = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Phi_{ij}\, u_i\, u_j , \qquad /4а/$$

где гармоническая матрица силовых постоянных Φ_{ij} является вариационным параметром. Конфигурационную подсистему, описывающую сильноангармонические колебания атомов, будем аппроксимировать гамильтонианом

$$H_s = \sum_i \left\{\frac{P_i^2}{2m} + \tilde{U}(r_i)\right\} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} C_{ij}(r_i - r_j)^2 , \qquad /4б/$$

где одночастичный ангармонический потенциал $\tilde{U}(r_i)$ и константа связи C_{ij} являются вариационными параметрами. Предполагая для простоты, что в элементарной ячейке имеется только два эквивалентных положения равновесия и учет туннелирования приводит к расщеплению основного состояния на симметричное (s) и антисимметричное (a) состояния в одночастичной яме, введем псевдоспиновое представление по волновым функциям $\psi_s(r)$ и $\psi_a(r)$:

$$\left\{\frac{P_i^2}{2m} + \tilde{U}(r_i)\right\}\psi_{s,a}(r_i) = \epsilon_{s,a}\psi_{s,a}(r_i) . \qquad /5/$$

Здесь и в /4б/ оператор импульса P_i является канонически сопряженной переменной к координате r_i . Переходя далее к псевдоспиновому представлению в /4б/, получим гамильтониан модели Де-Жена:

$$H_s = -\Omega \sum_i \sigma_i^x - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\sigma_i^z\,\sigma_j^z + E_o , \qquad /6/$$

где

$$\Omega = \frac{1}{2}(\epsilon_a - \epsilon_s) + r_-^2 C_o , \qquad E_o = \frac{1}{2}(\epsilon_a + \epsilon_s) + r_+^2 C_o ,$$

$$J_{ij} = 2 r_{sa}^2 C_{ij} , \qquad r_\pm^2 = \frac{1}{2}(r_{aa}^2 \pm r_{ss}^2), \qquad C_o = \sum_j C_{ij} \qquad /6а/$$

и $r_{\mu\nu}$ - матричные элементы по волновым функциям ψ_μ , ψ_ν в /5/, $\mu, \nu = \{a, s\}$.

В вариационном методе Боголюбова вычисляется свободная энергия

$$F_1 = F_o + \langle H - H_o \rangle_o , \qquad /7/$$

где

$$F_o = -T \ell n\, Sp\{e^{-\frac{H_o}{T}}\}, \qquad /7а/$$

$$\langle H - H_o \rangle = Sp\{e^{\frac{F_o - H_o}{T}}(H - H_o)\} = \qquad /7б/$$

$$= \sum_i \langle U(r_i + u_i)\rangle_o + \frac{1}{2}\sum_{ij}\langle V(r_i + u_i, r_j + u_j)\rangle_o -$$

$$- \sum_i \langle \tilde{U}(r_i)\rangle_o - \frac{1}{2}\sum_{ij}\Phi_{ij}\langle u_i u_j\rangle_o - \frac{1}{2}\sum_{ij} C_{ij}\langle (r_i - r_j)^2\rangle_o ,$$

и вариационные параметры пробного гамильтониана /4/ находятся из условий стационарности свободной энергии /7/ по отношению к вариации по этим параметрам или, эквивалентно, по соответствующим корреляционным функциям. Переходя в /7/ к псевдоспиновому представлению аналогично /6/, получим уравнения:

$$\Phi_{ij} = \frac{\delta}{\delta < u_i \; u_j >_o} \{ 2 \sum_i < U(r_i + u_i) >_o +$$

$$+ \sum_{i \neq j} < V(r_i + u_i, r_j + u_j) >_o \}, \qquad /8а/$$

$$2 r_{sa}^2 C_{ij} = \frac{\delta}{\delta < \sigma_i^z \sigma_j^z >} < V(r_i + u_i, r_j + u_j) >_o , \qquad /8б/$$

$$\frac{\delta}{\delta < \sigma_i^x >_o} \sum_i < \tilde{U}(r_i) >_o = \frac{\delta}{\delta < \sigma_i^x >_o} \{ \sum_i < U(r_i + u_i) >_o +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ij} < V(r_i + u_i, r_j + u_j) >_o - \frac{1}{2} \sum C_{ij} < r_i^2 + r_j^2 >_o \}. \qquad /8в/$$

Самосогласованная система уравнений /4/-/6/, /8/ определяет фазовый переход в модели и описывает взаимное влияние фононной и псевдоспиновой подсистем друг на друга.

3. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МОДЕЛИ

Рассмотрим простую модель структурного фазового перехода, выбирая одночастичный потенциал в /2/ в виде двойной ямы, а парный потенциал записывается в гармоническом приближении:

$$H = \sum_i \left(\frac{P_i^2}{2m} - \frac{A}{2} s_i^2 + \frac{B}{4} s_i^4 \right) + \frac{1}{4} \sum_{ij} \phi_{ij} (s_i - s_j)^2 . \qquad /9/$$

Эта модель получила в последнее время широкое распространение при исследовании физической картины структурного фазового перехода /см.[5] и, например,[2] /. Пользуясь уравнениями /8/, для вариационных параметров в пробном гамильтониане /4/ находим следующие выражения:

$$\Phi_{ij} = \delta_{ij} (\Delta + \phi_o) - \phi_{ij} (1 - \delta_{ij}), \quad 2 C_{ij} = \phi_{ij} , \qquad /10/$$

где

$$\Delta = -A + 3B (< u_i^2 >_o + < r_i^2 >_o), \quad \phi_o = \sum_j \phi_{ij} . \qquad /10а/$$

Эффективный одночастичный потенциал в /4б/ может быть записан в виде:

$$\tilde{U}(r_i) = -\frac{\tilde{A}}{2} r_i^2 + \frac{B}{4} r_i^4 , \quad \tilde{A} = A - 3B < u_i^2 >_o . \qquad /11/$$

Корреляционные функции смещений в /10а/ определяются уравнениями

$$< u_i^2 >_o = \frac{1}{Nm} \sum_q \frac{1}{2\omega_q} \operatorname{cth} \frac{\omega_q}{2T} , \qquad /12/$$

и

$$< r_i^2 >_o = r_+^2 - r_-^2 < \sigma_i^x > , \qquad /13/$$

где частота фононов находится из уравнения:

$$m \omega_q^2 = \Delta + \phi_o - \phi_q , \quad \phi_q = \sum_j \phi_{ij} e^{-iq(x_i^o - x_j^o)} , \qquad /12а/$$

а матричные элементы $r_\pm^2 = \frac{1}{2}(r_{aa}^2 \pm r_{ss}^2)$ и среднее значение $< \sigma_i^x >$ определяются для псевдоспинового гамильтониана /6/ по волновым функциям в /5/ с потенциалом /11/.

Уравнения /12/, /13/ играют роль условий самосогласования, которые описывают взаимное влияние фононной и псевдоспиновой систем друг на друга. Частота фононов в /12а/ зависит согласно /10а/, /13/ от состояния псевдоспиновой подсистемы - корреляционная функция $< r_i^2 >$ играет роль среднеквадратичного равновесного положения осциллятора. В то же время параметры псевдоспинового гамильтониана J_{ij} и Ω в /6/ существенно зависят от состояния фононной подсистемы через эффективный одночастичный потенциал /11/. С ростом температуры величина связи $J_{ij} = r_{sa}^2 \phi_{ij} \lesssim \tilde{r}_o^2 \phi_{ij}$ уменьшается, а частота туннелирования Ω возрастает, так как высота потенциального барьера $\tilde{u}_o = \tilde{A}^2/4B$ понижается ($\tilde{u}_o < u_o = A^2/4B$), а расстояние между минимумами $2\tilde{r}_o^2 = 2\tilde{A}/B$ уменьшается ($\tilde{r}_o^2 < r_o^2 = A/B$). Физически эта перенормировка параметров с ростом температуры объясняется увеличением заселенности высших /относительно ϵ_s, ϵ_a / уровней, которые определяют возбуждения фононного типа.

Фазовый переход в модели описывается решением самосогласованной системы уравнений, которое может быть получено вследствие /5/ только численным образом. Рассмотрим здесь поэтому только качественную картину фазового перехода. Как было показано ранее в ряде работ /например,/3,4/ /, переходу типа порядок - беспорядок в модели /9/ соответствует случай слабой связи: $\phi_o \ll A$. Поэтому в области температур, где $\phi_o \ll \tilde{A} = A - 3B\langle u_i^2 \rangle$, возможен переход типа порядок - беспорядок в псевдоспиновой подсистеме /6/ относительно параметра порядка $\sigma^z = \langle \sigma_i^z \rangle$. В приближении молекулярного поля /см., например,/1/ / температура перехода определяется уравнением:

$$T_c = J_o \frac{2q}{\ell n \frac{1+q}{1-q}}, \qquad q = \frac{\Omega}{J_o} < 1. \qquad /14/$$

Максимальная температура достигается при $\Omega \ll J_o = \sum_j J_{ij} = r_{sa}^2 \phi_o$, когда можно пренебречь туннелированием и воспользоваться оценкой:

$$r_{ss}^2 \sim r_{aa}^2 \sim (r_{sa})^2 \sim \tilde{r}_o^2 = \frac{\tilde{A}}{B} = \frac{A}{B}(1 - 3\frac{B}{A}\langle u_i^2 \rangle). \qquad /15/$$

В этом пределе для температуры перехода получаем

$$T_c \approx J_o \approx \phi_o \tilde{r}_o^2 = \phi_o \frac{\tilde{A}}{B} \qquad /14a/$$

и, следовательно, $T_c \ll \tilde{u}_o = \tilde{A}^2/4B$. В этой области температур ($\phi_o \ll \tilde{A}$) фононные возбуждения не играют существенной роли:

$$\langle u_i^2 \rangle \sim \frac{T}{m\omega_o^2} < \frac{T_c}{2\tilde{A}} = \frac{\phi_o}{2\tilde{A}} \cdot \frac{\tilde{A}}{B} \ll \tilde{r}_o^2 = \frac{\tilde{A}}{B}, \qquad /16/$$

где для фононной частоты была использована оценка $m\omega_o^2 \sim \Delta + \phi_o \sim -\tilde{A} + 3B\tilde{r}_o^2 + \phi_o = 2\tilde{A} + \phi_o \sim 2\tilde{A}$.

С ростом температуры возможно изменение характера связи: $\phi_o \gg \tilde{A}$ /даже при $\phi_o \ll A$ /, когда появляется возможность перехода типа “смещение“. В предельном случае сильной связи ($\phi_o \gg A$) переход типа “смещение“ определяется появлением мягкой моды ($\Delta(T_o) \to 0$) и обращением в ноль смещений атомов относительно центра ячейки ($\tilde{r}_o^2(T_o) \to 0$). Температура перехода T_o в классическом пределе оценивается согласно /10а/, /11/ уравнением

$$\tilde{A}(T_o) = 0, \qquad \langle u_i^2 \rangle = \frac{1}{3}\frac{A}{B}, \qquad T_o \sim \frac{1}{3}\phi_o \frac{A}{B}, \qquad /17/$$

где средняя фононная частота в /12/ в пределе сильной связи оценивается выражением $m\omega_o^2 \sim \phi_o$. В отличие от T_c в /14а/ $T_o \gg u_o = A^2/4B$ - высоты потенциального барьера. При этом в данной модели всегда

$$T_c \sim \phi_o(\tilde{A}/B) < T_o \sim \phi_o(A/B).$$

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Предложенную в настоящей работе модель можно рассматривать как обобщение известной модели Де-Жена для описания переходов типа“порядок-беспорядок“: в отличие от последней в данной модели помимо двух нижних уровней /обусловленных расщеплением основного состояния на ϵ_s, ϵ_a при учете туннелирования/ принимаются во внимание и все возбужденные состояния ангармонического осциллятора в одночастичном потенциале. Эти состояния описываются в фононном представлении /в отличие от псевдоспиновой модели для трех уровней/ в псевдогармоническом приближении /4б/. В результате удается в рамках одной модели описать достаточно сложный спектр системы связанных сильноангармонических осцилляторов, представив его в виде низколежащих сильноангармонических возбуждений, обусловленных туннелированием /в отличие от [2], где псевдоспиновые возбуждения связаны с классическим перебросом через барьер/, и высоколежащих возбуждений фононного типа, более слабое ангармоническое взаимодействие которых учитывается в приближении самосогласованного фононного поля /4б/, /8а/.

Некоторым недостатком такого искусственного разделения системы на псевдоспиновую подсистему с гамильтонианом /6/ и фононную /4а/ является искажение истинного спектра ангармонического осциллятора в двойной яме*: получающийся одночастичный спектр можно записать в виде $\epsilon_n = \hbar\omega_0(n+\frac{1}{2})\pm\hbar\Omega$ $(n=0,1,2\ldots)$ вместо весьма сложного спектра в двойной яме /см., например, [2,10,11] /. Однако в вариационном подходе к решению задачи на основе минимизации свободной энергии системы этот недостаток не должен играть существенной роли: в области низких температур, $kT \sim \hbar\Omega$, основной вклад дает лишь туннелирующая мода, а в области высоких температур, $kT \sim \hbar\omega_0$, дополнительное расщепление фононной моды на малую величину $\hbar\Omega << \hbar\omega_0$ несущественно /при должной нормировке статистической суммы/. Очевидно, что предложенная модель дает лишь интерполяционное описание фазового перехода, в котором наименее точно описывается область температур, когда $\Omega \sim \omega_0$ и разделение на две подсистемы физически не обосновано. Более последовательный расчет спектра системы связанных ангармонических осцилляторов, проведенный в работе [11], требует выполнения сложных численных расчетов, что затрудняет получение простых оценок и обсуждение физической картины фазового перехода.

При исследовании реальных систем предложенная модель может быть использована для описания фазового перехода типа порядок-беспорядок в кристаллах, где энергия возбужденных состояний активной группы атомов лежит в области температуры перехода: $kT_c \sim J_0 \sim \hbar\omega_0$. В этом случае неизбежна сильная перенормировка эффективной константы связи J_{ij} и частоты туннелирования Ω при описании перехода в рамках модели Де Жена /6/. Например, при дейтерировании водородосодержащих соединений следует ожидать более сложной перенормировки этих параметров /см. раздел 3/, чем возникающей только при учете изменения массы туннелирующих комплексов. При некотором обобщении предложенная модель может быть полезна при исследовании динамики решетки неупорядоченных систем, в которых существенную роль играет туннелирование атомов относительно нескольких случайных положений равновесия.

* Мы благодарны проф. Б.Жекшу, который обратил наше внимание на этот недостаток расчета.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика решетки. "Мир", М., 1975.*
2. *Beck H. J.Phys.C: Solid St. Phys., 1976, 9, p.33.*
3. *Stamenkovic S. e.a. Phys. Rev., 1976, B14, p.5080.*
4. *Аксенов В.Л. и др. ФТТ, 1976, 18, с.2921.*
5. *Gillis N.S. In: Dynamical Properties of Solids, ed. G.K.Horton, A.A.Maradudin, North-Holland, Amsterdam, 1975, v.2, p.107-150.*
6. *Stamenkovic S. e.a. Acta Phys. Hung., 1977, 42, p.265.*
7. *Thomas H. In: Structured Phase Transition and Soft Modes, ed. by F.Samuelson, E.Anderson, J.Feder, Universitetforlaget, Oslo, 1971, p.15.*
   Pytte E., Feder J. Phys.Rev., 1969, 187, p.1077.
8. *Moore M.A., Williams H. J.Phys., 1972, C5, p.3168.*
9. *Priezzev V.B. Acta Phys. Polon., 1971, A39, p.401.*
10. *Blinc R. J.Phys.Chem.Sol., 1960, 13, p.204.*
11. *Стасюк И.В. Препринт ИТФ-75-108Р, Киев, 1975.*

Рукопись поступила в издательский отдел 29 августа 1978 года.