C 326

11-757

AAGOPATODMA TEOPETMUECKON OMIMIK

ФММ, 1969, т. 27, 8.2, с. 193-200

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ Дубяа

P4 - 3746

18/10-6

В.Б. Приезжев

О РАСЧЕТЕ КОНСТАНТ СВЯЗИ АТОМОВ ПРИМЕСЕЙ В МЕТАЛЛАХ

1968

Приезжев В.Б.

P4-3746

О расчёте констант связи атомов примесей в металлах

Изучаются силовые постоянные решетки Си с примесями Ве. Определены изменения силовых постоянных в нулевой и первой координационной сфере.

Произведено разделение в явном виде вкладов в силовые постоянные от короткодействующих и дальнодействующих сил и вычислено их изменение при внесении примеси.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1968.

Priezzhev V.B.

P4-3746

On the Calculation of the Coupling Constants of the Atoms in Metals Admixtures.

Strength constants in the Cu lattice with the Be admixtures are investigated. Changes of the strength constants in the zero and first coordination sphere are determined. An explicit separation of the contributions to the strength constants of short- and long-range forces is made and their changes are measured when introducing the admixtures.

> Preprint. Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1968

P4 - 3746

В.Б. Приезжев

it.

.

ーンマイ

О РАСЧЕТЕ КОНСТАНТ СВЯЗИ АТОМОВ ПРИМЕСЕЙ В МЕТАЛЛАХ

Направлено в журнал "Физика металлов и металловедение"



1. В ведение

Известно, что при внесении примеси в кристаллическую решетку в спектре колебаний матрицы могут возникнуть дополнительные частоты, называемые локальными (см., например, /1/). Существование таких дополнительных колебаний обусловлено разницей масс матрицы и примеси, а также изменением силовых постоянных в окрестности примеси. Вопрос об изменении силовых постоянных решетки при внесении легкой примеси выяснен окончательно. В работе /2/ определялась локальная частота не решетки меди с примесями Ве по неупругому рассеянию нейтронов. При этом была сделана оценка изменения силовой постоянной Δ $\Phi_{o,o}$ в нулевой координационной сфере. Это изменение оказалось значительным (~ 50%). При расчёте использовалось приближение, в котором изменение силовых постоянных во всех координационных сферах, кроме нулевой, не учитывалось явно. Такое приближение эквивалентно допущению. что изменение силовых постоянных в первых координационных сферах пренебрежимо мало и может оказаться слишком грубым для большинства реальных кристаллов. Поэтому необходимо более детальное изучение изменения Δgaβ силовых постоянных как функции расстояния до примеси. Выделение в явном виде вклада в силовые постоянные от дальнодействующих сил (межионное кулоновское, электрон-электронное и электрон-ионное взаимодействие), см/3/, позволяет описать $\Delta \Phi_{a}^{a\beta}$ небольшим числом параметров. Это дает возможность найти изменение силовых постоянных в первых координационных сферах, если известна локальная частота и значение параметров псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия.

3

2. Учёт изменения силовых постоянных в первой координационной .

сфере

Локальная частота может быть определена из известного детерминантного уравнения (см., например, ^{/4/})

$$|\Phi \ a\beta(\vec{k}) - \omega^2 \delta_{a\beta}| = 0, \qquad (1)$$

где $\Phi^{\alpha\beta}(\vec{k})$ – фурье-компонента силовой постоянной однокомпонентной решетки $\Phi^{\alpha\beta}_{\alpha\beta}$.

Но удобнее, вводя функцию Грина

$$G_{nm}^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{MN} \sum_{\vec{k}_{1}} \frac{v_{\vec{k}_{1}}^{\alpha} v_{\vec{k}_{1}}^{\beta}}{\omega^{2} - \omega_{\vec{k}_{1}}^{2}} \exp\left\{i\vec{k}\left(\vec{R}_{n} - \vec{R}_{m}\right)\right\}$$
(2)

(здесь $\omega_{\mathbf{t}_{i}}$ и $\mathbf{v}_{\mathbf{t}_{i}}$ - частота колебаний и вектор поляризации идеальной решетки, соответствующие волновому вектору \mathbf{t} и номеру ветвиј).определять локальные частоты из уравнения

$$|\delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} - G_{n\ell}^{\alpha\gamma} v_{\ell m}^{\gamma\beta}| = 0, \qquad (3)$$

где $V \frac{a\beta}{\ell_m}$ - матрица, определяемая разностью масс ионов основной решетки и примеси, а также изменением силовых постоянных $\Delta \Phi_{nm}^{a\beta}$. обусловленным введением примеси/1/.

$$V_{\ell m}^{\gamma\beta} = \omega^2 \Delta M \delta_{m0} \delta_{\ell m} \delta_{\gamma\beta} + \Delta \Phi_{\ell m}^{\gamma\beta}. \qquad (4)$$

Такой вид $v_{\ell_m}^{\gamma\beta}$ получен в предположении, что концентрация примеси мала, и примесный атом находится в нулевой ячейке ($\ell = 0$).

В дальнейшем ограничимся рассмотрением первой координационной сферы и примем упрощающее предположение/5/:

$$\Delta \Phi_{0n}^{\alpha\beta} = 0$$
, если $\alpha \neq \beta$.

Последнее допущение дает возможность факторизовать детерминантное уравнение (3)⁶, но, не являясь физически обоснованным, делает последующие вычисления приближенными. Воспользовавшись симметрией гранецентрированной решетки, запишем

$$\Delta \Phi \stackrel{\alpha \alpha}{}_{00} = \Delta \Phi_{00} ; \Delta \Phi_{0i} \stackrel{\alpha \alpha}{}_{0i} = \Delta \Phi_{0i} (i = 1, 2 \dots 8).$$

Четыре оставшихся силовых постоянных в первой координационной сфере в рассматриваемом приближении малы, т.к. они описывают проекцию силы, действующей между атомами, лежащими в плоскости, на ось, перпендикулярную к этой плоскости, и поэтому мы их не будем учитывать.

Из (3) и (4) с учётом принятых предположений получим уравнение

$$\left[1 - \left(\left(\Delta M \omega^{2} + \Delta \Phi_{00}\right) G_{00} + 8 \Delta \Phi_{01} G_{01}\right)\right]$$

$$\times [1 - 8 \Delta \Phi_{01} G_{01}] - 8 [(\Delta M \omega^2 + \Delta \Phi_{00}) G_{01} + (5)]$$

$$+ \Delta \Phi_{01} \sum_{i=1}^{8} G_{11} \Delta \Phi_{01} G_{00} = 0,$$

$$G_{nm} = G_{nm}^{aa} \qquad a = 1, 2, 3.$$

где

Поскольку локальная частота ω является решением уравнения (3), уравнение (5) при $\omega = \omega_{+}$ выражает зависимость между изменениями силовых постоянных $\Delta \Phi_{00}$ и $\Delta \Phi_{01}$ в нулевой и первой координационной сферах.

Расчёты этой зависимости проводились на электронной машине с использованием экспериментально построенных дисперсионных кривых меди/7/и значения локальной частоты, найденного в работе/2/.

Результат расчёта приведен на рис. 1.

Если бы изменение силовых постоянных происходило лишь в первой координационной сфере, в случае гранецентрированной решетки с учётом принятых предположений выполнялось бы соотношение

$$\Delta \Phi_{00} = -8\Delta \Phi_{01} \quad . \tag{6}$$

дополняющее систему уравнений относительно $\Delta \Phi_{00}$ и $\Delta \Phi_{01}$.

Решению этой системы (точка А) соответствуют изменения силовых постоянных в первой и нулевой координационной сферах.

$$\frac{\Delta \Phi_{00}}{\Phi_{00}} \cong \frac{\Delta \Phi_{01}}{\Phi_{01}} \cong 70 \%$$

Решение, соответствующее приближению, принятому в/2/, дает:

$$\frac{\Delta \Phi_{00}}{\Phi_{00}} \cong 40\% , \quad \frac{\Delta \Phi_{01}}{\Phi_{01}} = 0.$$

3. Определение вклада дальнодействующих сил в Ф ав в т

Чтобы перейти от выражения (6) к более точному соотношению, необходимо учесть силовые постоянные других координационных сфер в сумме

$$\Delta \Phi_{i} \frac{a\beta}{00} = -\sum_{i} \Delta \Phi_{0i} \frac{a\beta}{0i}$$

При этом желательно представить $\Delta \Phi_{nm}^{\alpha\beta}$ небольшим числом параметров, чтобы получить не слишком громоздкую систему уравнений относительно этих параметров. Запишем гамильтониан электрон-ионной системы в виде

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{i} + \mathbf{H}_{e} + \mathbf{H}_{ei} \tag{7}$$

$$H_{i} = \sum_{i} \frac{F_{i}^{2}}{2M_{i}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\pi_{i} \pi_{j} e^{2}}{|R_{i} - R_{j}|} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi(\vec{R}_{i} \vec{R}_{j}).$$
(8)

Здесь применены обычные обозначения для импульсов, координат и масс ионов в первых двух членах ионного гамильтониана. Суммирование проводится по всем узлам решетки, включая узлы примесей. Последний член гамильтониана H_i описывает некулоновское взаимодействие между ионами, которое предполагается короткодействующим. Гамильтониан электронной системы запишем в виде

$$H_{e} + H_{ei} = \sum_{k} \frac{k^{2}}{2M} a_{k}^{+} a_{k} + \sum_{qp} \Delta A(q) a_{p}^{+} a_{p-q}^{+}$$

$$+ \sum_{qp n} \sum_{n} A_{n}^{\alpha}(q) a_{p}^{+} a_{p-q}^{-} u_{n}^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{kk'} \frac{4\pi e^{2}}{q^{2}} a_{k-q}^{a} a_{k+q}^{+} a_{k'}^{+} a_{k'}^{-} a_{k}^{+};$$

$$\Delta A(q) = \Delta V^{*}(q) \frac{1}{V} \sum_{n} c_{n} e^{-iq R_{n}^{0}}; V_{n}^{\alpha} = iq^{\alpha} \frac{1}{V} V_{n}^{*}(q) e^{-iq R_{n}^{0}}.$$
(9)

Здесь введен псевдопотенциал V^{*}_p(q) электрон-ионного взаимодействия (см.,например,^{/3/}). Функция с_в принимает значение ⁰ в узлах матрицы и 1 - в узлах примесей

$$\Delta V^{*}(q) \simeq V^{*}(q) - V^{*}(q)$$

где V^{*}₁(q) и V^{*}₀(q) -псевдопотенциалы ионов основной решетки и примеси, соответственно. Вклад межионного кулонвоского взаимодействия в силовые постоянные вычисляется непосредственным дифференцированием второго члена в (8)

$$K_{ij}^{\alpha\beta} = 4\pi e^2 Z_i Z_j \sum_q \frac{q_q q_\beta}{q} \exp\{i\vec{q} (\vec{R}_i - \vec{R}_j)\}.$$
(10)

Выражение для вклада электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействий удобно получить, используя уравнение для запаздывающей функции Грина

$$G_{na}^{\alpha\beta}$$
, $\equiv \ll u_{n}^{\alpha}$; u_{n}^{β} , \gg

с гамильтонианом (7)/8/.

$$(i\frac{d}{dt})^2 M_n G_{nn'} = \delta(t-t') \delta_{nn'}^{\alpha\beta} + \sum_{m\gamma} (\Phi^*_{nm} + K_{nm}) G_{mn'}^{\gamma\beta}$$

$$+ \sum_{qp} A_n^{\alpha}(q) \ll a_p^{+} a_{p-q}; u_{n'}^{\beta} \gg .$$

Здесь

$$\Phi^{*\alpha\gamma}_{nm} = \frac{\partial}{\partial R^{\alpha} \partial R^{\gamma}} \left(\frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi(\vec{R}_{i}\vec{R}_{j}) \right)$$

вклад от короткодействующей части межионного взаимодействия.

Уравнение для функции Грина, определяющей вклад от электрон-электронного взаимодействия $\ll a + a$; $u \xrightarrow{\beta} >>$, имеет вид:

$$(i \frac{d}{dt}) \ll a_{p}^{+} a_{p-q}^{-}; u_{n}^{\beta} \gg = (\epsilon_{p-q}^{-}, \epsilon_{p}) \ll a_{p}^{+} a_{p-q}^{-}; u_{n}^{\beta} \gg$$

$$+ \sum_{q'm} A_{m}^{\alpha}(q') \ll (a_{p}^{+} a_{p-q-q'}^{-} - a_{p+q'}^{+}, a_{p-q}^{-}) u_{m}^{\gamma}; u_{n}^{\beta} \gg +$$

$$+ \sum_{q'm} \Delta A(q') \ll (a_{p}^{+} a_{p-q-q'}^{-} - a_{p+q'}^{+}, a_{p-q}^{-}); u_{n}^{\beta} \gg +$$

$$+ \sum_{a'} \Delta A(q') \ll (a_{p}^{+} a_{k+q}^{+} a_{k}^{a} a_{q'+p-q}^{-} - a_{k-q'}^{+}, a_{p+q'}^{+} a_{p-q}^{-} a_{k}^{+}); u_{n}^{\beta} \gg +$$

Пользуясь приближением случайных фаз для электрон-электронного рассеяния и предполагая, что электрон-ионное рассеяния мало, можно произвести расцепление полученной цепочки уравнений (см., например,^{/8/}). Переходя затем к фурье-представлению функций Грина см.^{/9/}, получим для вклада электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействия в силовые постоянные выражение

$$\Pi_{nm}^{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{q} \stackrel{\alpha}{}_{q} \stackrel{\beta}{}_{v_{n}^{\alpha}(q)} V_{m}^{*}(q) \exp\{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_{n}^{0} - \vec{R}_{m}^{0})\} = \frac{1 - \epsilon(q, \omega)}{\epsilon(q, \omega) 4\pi e^{2}/q^{2}}, \quad (11)$$

где ε(q,ω) — диэлектрическая проницаемость в приближении случайных фаз

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2 V} \sum_{p} \frac{n_p - n_{p-q}}{\omega - \omega_{pq}}$$

Вид функции V*(q) можно выбрать в форме Бардина (см., например, /3/)

$$V_{n}^{*}(q) = \left(-\frac{4\pi Z_{n} e^{2}}{q^{2} V_{0}} + \sigma_{n}\right) \chi (qr_{s})$$

$$\chi (qr_{s}) = \frac{3(\sin(qr_{s}) - qr_{s}\cos(qr_{s}))}{(qr_{s})^{8}}$$

где г_в -безразмерная плотность электронного газа, σ_n - параметр псевдопотенциала.

Таким образом, произвольная силовая постоянная может быть записана в виде

$$\Phi_{nm}^{\alpha\beta} = \Phi_{nm}^{\ast\alpha\beta} + K_{nm}^{\alpha\beta} + \prod_{nm}^{\alpha\beta} (0),$$
 (12)

причём Ф * а в можно считать отличной от нуля лишь в первой координационной сфере, а дальнодействующая часть силовых постоянных зависит от параметров σ_n и r_s . Из (10), (11), (12) следует выражение для изменения силовых постоянных, обусловленного присутствием примеси

$$\Delta \Phi_{nm}^{\alpha\beta} = \Delta \Phi_{nm}^{*\alpha\beta} + \Delta \Pi_{nm}^{\alpha\beta} + \Delta K_{nm}^{\alpha\beta}$$
(13)

1 4 4 1

$$\Delta \Pi_{nm}^{\alpha\beta} = \sum_{q} q^{\alpha} q^{\beta} V_{1}^{*}(q) \Delta \sigma \chi (qr_{s}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_{m}^{0} - \vec{R}_{m}^{0}} - \frac{1 - \epsilon}{\epsilon 4 \pi e^{\frac{1}{2}/q^{2}}} +$$

$$+ \sum_{n} q^{\alpha} q^{\beta} \frac{\partial^{2}}{\partial Z_{n} \partial Z_{m}} (\mathbf{V}^{*}(q) \mathbf{V}^{*}(q)) \Delta Z_{n} \Delta Z_{m} e^{-i \vec{q} (\vec{R}_{n} - \vec{R}_{m})} \frac{1 - \epsilon}{\epsilon \cdot 4\pi e^{2}/q^{2}},$$
(14)

где $\Delta \sigma$ -разность псевдопотенциалов матрицы и примеси, а $\Delta \kappa_{nm}^{\alpha\beta}$ связано с изменением заряда примеси по сравнению с ионами матрицы. Предполагается, что параметр r_{s} , связанный с электронной плотностью, не изменяется при внесении примеси. Если известно $\Delta \sigma$, то в приближении

$$\Delta \Phi_{nm}^{*a\beta} = \Delta B \delta_{a\beta} \delta_{0m} \delta_{nj}$$
(15)

(j – индексы первой координационной сферы) получим параметрическую зависимость $\Delta \Phi_{00}$ от $\Delta \Phi_{01}$

$$\Delta \Phi_{00} = -8 \Delta B - \sum_{i=1}^{\infty} (\Delta \Pi_{0i} + \Delta K_{0i})$$

$$\Delta \Phi_{0i} = \Delta B + \Delta \Pi_{0i} + \Delta K_{0i}$$
(16)

где
$$\Delta \prod_{0i} \equiv \Delta \prod_{0i}^{aa}$$

 $\mu \qquad \Delta K \equiv \Delta K \frac{aa}{0i}$ (a = 1,2,3).

(16) вместе с (5) образует систему уравнений для определения $\Delta \Phi_{01}$ и $\Delta \Phi_{00}$. Применение изложенного метода определения силовых постоянных не ограничено приближением (15), но вне его становится малоэффективным, т.к. считается, что дальнодействие хорошо описывается членами (10) и (11)/3/.

4. Оценка изменения
$$\prod_{n m}^{a\beta}$$
 и $K_{nm}^{a\beta}$

Поскольку значение $\Delta \sigma$ в уравнении (14) не предполагалось известным, была произведена оценка $\Delta \prod_{nm}^{a\beta}$ при различных значениях $\Delta \sigma$. Для того чтобы сделать оценку изменения силовых постоянных при варьировании σ , необходимо определить значение параметра σ для идеальной решетки. Для вычисления этого параметра мы воспользовались методом, изложенным в работе^{/3/}. При расчёте использовались

дисперсионные кривые меди, полученные в работе^{/7/}. Для параметра **о** получено значение

Далее определялась величина вклада в силовые постоянные от электронфононного взаимодействия при значениях параметра о в пределах +30% от его значения в идеальной решетке. Расчёт показал, что такое o a B изменение параметра о приводит к изменению в первой координационной сфере не более чем на 1%. (Под значением силовой постоянной здесь подразумевается величина, полученная методом наименьших квадратов из дисперсионных кривых/7/). Поэтому в дальнейшем 1-й член в (14) не учитывается. При оценке изменения кулоновского вклада в силовые постоянные нужно рассмотреть следующие возможности: двухвалентный бериллий образует ионный остов с зарядом 0,1,2 в зависимости от того, сколько внутренних электронов становится свободными. Заранее исключить какой-либо из этих случаев трудно, т.к. энергия Ферми кристалла меди приблизительно равна потенциалу ионизации Ве. В первом и третьем случае $\Delta Z = -1$ и $\Delta Z = +1$ соответственно, a BO втором ∆ Z =0, т.е. изменения кулоновского вклада не происходит. Наконец, может оказаться, что увеличение плотности электронов в области избыточного заряда приведет к эффективному экранированию заряда примеси, и в рамках принятого приближения необходимо положить $\Delta Z = 0$.

Решение, соответствующее этому значению ΔZ, изображается точкой A на графике.

Рассмотрим случай $\Delta Z = 1$. Если принять приближение, в котором псевдопотенциал электронного взаимодействия имеет вид кулоновского потенциала, т.е.

$$V^*(q) = V(q)$$

для всех ч, то можно объединить третий член в (13) со вторым в (14). Получится обычное выражение для экранированного кулоновского взаимодействия

$$\Delta K_{nm}^{\alpha\beta} = \frac{4\pi e^2 \Delta Z_n \Delta Z_m}{V_0 N} \sum_{q} \frac{q_a q_\beta}{q^2 + \lambda^2(q)} e^{-i\vec{q}(R_n - R_m)}, \quad (17)$$

где Х(q) находится по формуле

$$\epsilon (q, 0) = 1 + \frac{\lambda^2 (q)}{q^2}.$$

Из (16) видно, что для определения $\Delta \Phi_{00}$ и $\Delta \Phi_{01}$ необходимо вычислить сумму $\sum_{i} \Delta K_{0i}$ и член ΔK_{0i} . Сумма вида (17) по узлам прямой решетки плохо сходится и для ее вычисления был использован метод Эвальда (см., например, ^{/4/}). В результате расчётов были получены значения

$$\Delta K_{00} = 5,46.10^4 \frac{\Delta u_{\rm H}}{CM} \qquad \Delta K_{01} = 0,62.10^4 \frac{\Delta u_{\rm H}}{CM}.$$

Легко указать решение системы (16) при найденных значениях ΔK_{00} и ΔK_{01} . Оно изображается точкой В на рис. 1. В точке А

$$\frac{\Delta |\Phi_{00}|}{|\Phi_{00}|} = 75 \% , \qquad \frac{\Delta |\Phi_{01}|}{|\Phi_{01}|} = 70 \% .$$

В точке В

$$\frac{\Delta |\Phi_{00}|}{|\Phi_{00}|} = 65\% \qquad \frac{\Delta |\Phi_{01}|}{|\Phi_{01}|} = 55\%.$$

5.Обсуждение

Полученные значения $\Delta \Phi_{00}$ и $\Delta \Phi_{01}$ позволяют сделать вывод о значительном изменении сильных постоянных в нулевой и первой координационных сферах решетки меди с примесями Ве. Отметим, что принятые приближения накладывают некоторые ограничения на интерпретацию полученных величин как действительных изменений силовых постоянных. В самом деле, при получении уравнения (5) изменение силовых постоянных за пределами первой координационной сферы не учитывалось явно. В то же время система (16) получена с учётом изменения силовой постоянной во всех координационных сферах. Поэтому величины $\Delta \Phi_{00}$ и

13

ΔΦ₀₁. играющие роль параметров в уравнении (5), будут иметь смысл изменения силовых постоянных в нулевой и первой координационной сферах (как это имеет место в уравнении (16)), если учёт изменения силовых постоянных во второй, третьей и т.д. координационных сферах мало влияет на определение локальной частоты из уравнения (3).

Непосредственным вычислением было установлено, что вклад электрон-фононного взаимодействия в изменение силовых постоянных пренебрежимо мал. Поэтому $\Delta \Phi_{n,m}^{\alpha\beta}$ определяется изменением кулоновского взаимодействия и близкодействующих сил. В случае совпадения заряда примеси с зарядом иона матрицы изменение близкодействующего вклада оказывается значительным ($\Delta B = 0.98.10^4 \frac{\Pi NH}{CM}$). Однако исследования близкодействия, основанные на восстановлении вида борн-майеровского потенциала из упругих постоянных и анализ дисперсионных кривых (см. например, ⁷⁷) указывают на то, что вклад близкодействия в силовые постоянные меди не превышает 0.3, $10^4 \frac{\Pi NH}{CM}$. Поэтому естественно предположить, что заряд примеси Ве отличен от заряда иона Си, и в этом случае изменение близкодействующего вклада $\Delta B = 0, 11.104 \frac{\Pi NH}{CM}$.

Заметим, наконец, что матрица силовых постоянных $\Phi^{a\beta}_{nm}$ недиагональная относительно верхних индексов, приближение в котором $\Delta \Phi^{a\beta}_{nm}$ диагонально, приводит, по-видимому, к несколько завышенным значениям

ΔФ₀₁ и ΔΦ₀₀.

В заключение я выражаю признательность Н.М.Плакиде, предложившему тему данной работы, за ценные замечания.

Литература

- 1. A.A.Maradudin, Reports on Prog. in Phys. XXVIII, 331, (1965).
- I.Natkaniec, K.Parlinski, A.Bajorek, M.Sudnik-Hrynkewicz, Phys. Lett., 24A, 517 (1967).
- 3. Е.Г.Бровман и Ю.Каган, ЖЭТФ 52, 557 (1967).
- 4. М.Борн, н Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ 1958.

- 5. А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вайсс, Динамическая теория кристаллических решеток в гармоническом приближении". Мир, 1965.
- 6. Ю.А.Изюмов, М.В.Медведев, ЖЭТФ <u>48</u>, 574 (1965).
- 7. S.K.Sinha, Phys. Rev., <u>143</u>, 422, 1966.
- 8. Н.М.Плакида, Препринт ОИЯИ Р4-2955, Дубна 1966.
- 9. Д.Н.Зубарев, УФН <u>71</u>, 71 (1966).

Рукопись поступила в издательский отдел 29 февраля 1968 года.



Рис. 1

•