СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 4575

Н.М.Плакида, Т.Шиклош

ТЕОРИЯ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

III. Трехмерная решетка

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1969

P4 - 4575

Н.М.Плакида, Т.Шиклош

ТЕОРИЯ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

III. Трехмерная решетка

1. Введение

В предыдущих работах нами был сформулирован общий метод, позволяющий исследовать свойства сильно ангармонических кристаллов [1], и была рассмотрена модель одномерной цепочки с взаимодействием ближайших соседей [2]. В настоящей работе на основе этого метода исследуются свойства трехмерного кристалла. Мы рассматриваем гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку с взаимодействием только ближайших соседей. Хотя эта модель годится для описания очень небольшого числа реальных кристалов, однако она позволяет получить решение задачи в аналитическом виде и сделать качественные предсказания о поведении реальных трехмерных кристаллов. Предварительно эта модель рассматривалась в псевдогармоническом приближении в [3] и была хорошо изучена в рамках обычной теории возмущений (см., например, [4,5]).

В разделе 2 на основе результатов работы [1] получена самосогласованная система уравнений для определения постоянной решетки в зависимости от давления и температуры, определения частоты фотонов и их затухания и внутренней энергии кристалла. В разделе 3 рассмотрены свойства кристалла при постоянном объеме. Результаты вычислений в случае малого ангармонизма сравниваются с расчетами в обычной теории возмущений [4,5]. В разделе 4 рассмотрены свойства кристалла при постоянном давлении. В этом случае кристаллическая решетка становится неустойчивой при достаточно высокой температуре или достаточно большой энергии нулевых колебаний. Определена критическая температура и исследовано поведение термодинамических величин вблизи и вдали от критической точки.

2. Самосогласованная система уравнений

Рассмотрим гранецентрированную кубическую решетку из N атомов с массой M. Гамильтониан кристалла при учете взаимодействия только ближайших соседей в приближении парных центральных сил имеет вид:

$$H = \sum_{\ell} \frac{P_\ell^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\ell \neq m}{}' \phi(|\vec{R}_\ell - \vec{R}_m|), \tag{1}$$

где приняты те же обозначения, что и в [1]. Штрих у знака суммы в (1) и далее означает, что суммирование проводится только по z ближайшим соседям (для ГЦК решетки $z = 12$).

В работе [1] получено выражение для функции Грина от операторов смещений атомов $u_\ell^\alpha = R_\ell^\alpha - \ell_\alpha$ в виде:

$$\langle\langle u_\ell^\alpha(t); u_{\ell'}^\beta(t')\rangle\rangle = \frac{1}{MN} \sum_{kj} \frac{e_{kj}^\alpha e_{kj}^\beta}{2\omega_{kj}} e^{i\vec{k}(\vec{\ell}-\vec{\ell}')} G_{kj}(t-t'), \tag{2}$$

где фурье-образ функции Грина, согласно (31)* x/, имеет вид:

$$G_k(\omega) = \langle\langle A_k | A_k^+ \rangle\rangle = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2 - 2\omega_k \Pi_k(\omega)}. \tag{3}$$

Векторы поляризации e_k^α и частоты фотонов ω_k $[k = (\vec{k}, j)]$ в (2) и (3) определяются в псевдогармоническом приближении согласно (23)* из уравнения:

$$\omega_{kj}^2 e_{kj}^\alpha = \frac{1}{M} \sum_{\ell,\beta}{}' e_{kj}^\beta (1 - e^{i\vec{k}\vec{\ell}}) \frac{\ell_\alpha \ell_\beta}{\ell^2} f(\theta, \ell). \tag{4}$$

---

x/ Здесь и далее (...) */ означает формулу из работы [1], а (...)**/ – из работы [2].

Массовый оператор, согласно (32)*, имеет вид:

$$\Pi_k(\omega) = \sum_{p,p'} |\tilde{\tilde{V}}_3(-k, p, p')|^2 \frac{1}{2} \left[(N_p + N_{p'}) \frac{\omega_p + \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \right.$$
$$\left. - (N_p - N_{p'}) \frac{\omega_p - \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \right] \tag{5}$$

где $N_p = \langle A_p^+ A_p \rangle$.

В случае парных сил функция $\tilde{\tilde{V}}_3$, согласно (21)*, равна:

$$|\tilde{\tilde{V}}_3(-k, p, p')|^2 = \frac{\Delta(\vec{p} + \vec{p}' - k)}{4M^3 N \omega_k \omega_p \omega_{p'}} g^2(\theta, \ell) F^2(-k, p, p'), \tag{6}$$

где

$$F(\vec{k}j, \vec{k}_1 j_1, \vec{k}_2 j_2) = \sum_n{}' (-1)^{\frac{d}{2}\vec{\tau}\vec{n}} (\vec{n}\vec{e}_{kj})(\vec{n}\vec{e}_{k_1 j_1})(\vec{n}\vec{e}_{k_2 j_2}) \times$$
$$\times \sin\left(\frac{d}{4}\vec{n}\vec{k}\right) \sin\left(\frac{d}{4}\vec{n}\vec{k}_1\right) \sin\left(\frac{d}{4}\vec{n}\vec{k}_2\right) \tag{7}$$

– безразмерная сумма по узлам решетки, $\vec{n} = \vec{\ell}/(d/2)$, d – период кубической решетки, ℓ –расстояние между ближайшими соседями, $2\pi\vec{\tau}$ – вектор обратной решетки.

В отличие от обычной теории возмущения [4,5] силовые постоянные $f(\theta, \ell)$ и $g(\theta, \ell)$ в выражениях (4) и (6) определяются самосогласованным образом:

$$f(\theta, \ell) = \tilde{\tilde{\phi}}''(\ell); \quad g(\theta, \ell) = \tilde{\tilde{\phi}}'''(\ell), \tag{8}$$

где $\tilde{\tilde{\phi}}(\ell)$ –самосогласованный парный потенциал. Следуя (44)*, определим его в псевдогармоническом приближении:

$$\tilde{\tilde{\phi}}(\vec{\ell} - \vec{m}) = \langle \phi(\vec{R}_\ell - \vec{R}_m) \rangle \approx$$
$$\approx \exp\left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \langle (u_\ell^\alpha - u_m^\alpha)(u_\ell^\beta - u_m^\beta) \rangle \nabla_\alpha \nabla_\beta \right\} \phi(\vec{\ell} - \vec{m}). \tag{9}$$

Выражение (9) значительно упрощается, если при вычислении производных, подобно [4], удерживать лишь старшую производную, а именно, воспользоваться приближением:

$$\nabla_{\alpha_1}\nabla_{\beta_1}\ldots\nabla_{\alpha_n}\nabla_{\beta_n}\phi(\ell)\approx\frac{\ell_{\alpha_1}\ell_{\beta_1}}{\ell^2}\ldots\frac{\ell_{\alpha_n}\ell_{\beta_n}}{\ell^2}\phi^{(2n)}(\ell), \tag{10}$$

где мы выбрали $\vec{m}=0$. В этом случае из (9) получаем

$$\tilde{\tilde{\phi}}(\ell)\approx\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{1}{2}\overline{u^2(\ell)}\right)^n\phi^{(2n)}(\ell), \tag{11}$$

где $\overline{u^2(\ell)}$ -средний квадрат относительного смешения соседних атомов. Вычисляя его с помощью функции Грина (2), (3), получаем:

$$\overline{u^2(\ell)}=\frac{1}{\ell^2}<[\vec{\ell}(\vec{u}_\ell-\vec{u}_0)]^2>=$$

$$=\frac{2}{NM}\sum_k\frac{(\vec{\ell}\vec{e}_k)^2}{\ell^2}2\sin^2\frac{\vec{k}\vec{\ell}}{2}\frac{N_k}{2\omega_k} \tag{12}$$

или, учитывая, что $\overline{u^2(\ell)}$ зависит только от расстояния ℓ между соседними атомами, при помощи уравнения (4) записываем его в более удобном виде:

$$\overline{u^2(\ell)}=\frac{1}{z}\sum_{\ell}{}'\,\overline{u^2(\ell)}=\frac{1}{f(\theta,\ell)}\frac{1}{zN}\sum_k\omega_k N_k. \tag{12a}$$

Как видно, для самосогласованного потенциала (11) мы получили такое же выражение, как и в одномерном случае (см. (13)**), что, очевидно, обусловлено тем, что в приближении (10) учитывается лишь продольная составляющая тензора смещений, которая дает основной вклад в псевдогармоническую перенормировку. Здесь мы не пользовались фурье-преобразованием потенциала в (9), как в работах [6,7], что позволит нам рассмотреть потенциалы с твердой сердцевиной.

Наконец, среднее расстояние между ближайшими соседями $\ell=d/\sqrt{2}$ можно определить из уравнения состояния (7)*, согласно которому давление P в нашем случае равно:

$$P=-\frac{1}{3V}\sum_{\ell,\alpha}\ell_\alpha<\frac{\partial U}{\partial R_\ell^\alpha}>=-\frac{z\ell}{6v}\tilde{\tilde{\phi}}'(\ell), \tag{13}$$

где $v=V/N$.

Таким образом, полученная система уравнений позволяет определить самосогласованным образом равновесные параметры решетки, частоту "реальных" фононов ϵ_{kj} и их затухание Γ_{kj}:

$$\epsilon_{kj}=\omega_{kj}+\mathrm{Re}\,\Pi_{kj}(\epsilon_{kj})=\omega_{0kj}\sqrt{\frac{f(\theta,\ell)}{f}}\left[1+\frac{\mathrm{Re}\,\Pi_{kj}(\epsilon_{kj})}{\omega_{kj}}\right], \tag{14}$$

$$\Gamma_{kj}(\epsilon_{kj})=-\mathrm{Im}\,\Pi_{kj}(\epsilon_{kj}+i\delta)\approx-\mathrm{Im}\,\Pi_{kj}(\omega_{kj}+i\delta), \tag{15}$$

где ω_{0kj}, согласно (4), - частота фононов в гармоническом приближении с силовой постоянной f.

Термодинамические характеристики кристалла определяются внутренней энергией, которая, согласно (46)*, может быть записана в виде:

$$E=<H>=\frac{N}{2}\{z\tilde{\tilde{\phi}}(\ell)+\epsilon(\theta)\}+5\tilde{\tilde{F}}_3(\theta), \tag{16}$$

где, пользуясь (12а), мы ввели:

$$\epsilon(\theta)=\frac{z}{2}f(\theta,\ell)\overline{u^2(\ell)}=\frac{1}{N}\sum_k\frac{\omega_k}{2}<A_k^+A_k>=$$

$$=\frac{1}{N}\sum_k\frac{1}{2\pi\omega_k}\int_0^\infty\frac{d\omega^2}{2\omega}\omega_k^2\,\mathrm{cth}\frac{\omega}{2\theta}[-\mathrm{Im}\,G_k(\omega+i\delta)] \tag{17}$$

и функцию

$$\tilde{\tilde{F}}_3(\theta)=\frac{1}{12}\sum_k\omega_k\{<B_k^+B_k>-<A_k^+A_k>\}=$$

$$=\frac{1}{12\pi}\int_0^\infty d\omega\,\mathrm{cth}\frac{\omega}{2\theta}\sum_k\frac{\omega^2-\omega_k^2}{\omega_k}[-\mathrm{Im}\,G_k(\omega+i\delta)]= \tag{18}$$

$$=-\frac{1}{6\pi}\int_0^\infty d\omega\,\mathrm{cth}\frac{\omega}{2\theta}\sum_k[\mathrm{Re}\,\Pi_k(\omega)\,\mathrm{Im}\,G_k(\omega+i\delta)+\mathrm{Im}\,\Pi_k(\omega+i\delta)\,\mathrm{Re}\,G_k(\omega+i\delta)],$$

при записи которой был использован явный вид функции Грина (3).

Заметим, что в работе /1/ в выражении (45)* при интеграции по частоте было использовано приближение $\Gamma_k \ll \epsilon_k$, т.е. $-\mathrm{Im}\, G_k(\omega+i\delta) \approx \delta(\omega^2-\epsilon_k^2)$, в котором не учитываются эффекты затухания, и в частности, теряется второй член в выражении (18), содержащий $\mathrm{Im}\,\Pi_k(\omega+i\delta)$, который, однако, имеет тот же порядок, что и первый член, содержащий $\mathrm{Re}\,\Pi_k(\omega)$. Легко показать, пользуясь (41)*, что выражение (18) является поправкой к свободной энергии по эффективному кубическому ангармонизму $|\tilde{\tilde{V}}_3|^2 \approx \lambda^6$, которая в низшем порядке по $|\tilde{\tilde{V}}_3|^2$ имеет вид:

$$\tilde{\tilde{F}}_3(\theta) \approx -\frac{1}{6}\sum_{k,p,p'} |\tilde{\tilde{V}}_3(k,p,p')|^2 \left\{ \frac{(1+n_p)(1+n_{p'})(1+n_k)-n_p n_{p'} n_k}{\omega_p+\omega_{p'}+\omega_k} + \frac{n_k(1+n_p+n_{p'})-n_p n_{p'}}{\omega_p+\omega_{p'}-\omega_k} \right\}, \tag{19}$$

где $n_p = [\exp(\omega_p/\theta)-1]^{-1}$. Выражение (19) совпадает с поправкой к свободной энергии за счет кубического ангармонизма, вычисленнной по обычной теории возмущений /4/, если в (19) не учитывать псевдогармонической перенормировки.

Учет эффектов затухания при интегрировании в (17) не может быть проведен так же просто, как в (18), и требует численного интегрирования. Однако, пользуясь явным видом массового оператора (5) как в случае высоких, так и низких температур, мы сможем получить приближенные формулы для (17).

а) Высокие температуры $(\theta \gg \omega_D)$. Следуя вычислениям в /4,5/, получаем для (5):

$$\Pi_k(\omega) = -\theta\,\frac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}\,\omega_k S_k(\nu), \tag{20a}$$

где $\nu = \omega/(\omega_L/2)$

$$S_k(\nu) = \frac{1}{32N}\sum_{p,p'} \frac{\Delta(\vec{p}+\vec{p}\,'-\vec{k})}{\lambda_k^2\lambda_p^2\lambda_{p'}^2} F^2(-k,p,p') \times$$
$$\times\left\{ \frac{(\lambda_p+\lambda_{p'})^2}{(\lambda_p+\lambda_{p'})^2-\nu^2} + \frac{(\lambda_p-\lambda_{p'})^2}{(\lambda_p-\lambda_{p'})^2-\nu^2} \right\}, \tag{21a}$$

– безразмерная сумма, вычисленная для некоторых значений в /5/ (см. таблицу 2 в /5/), где

$$\mathrm{Re}\, S_k(\lambda_k) \approx 1,1\cdot 10^4 c_k^2 [\delta_k / c_k(T/\theta)],$$

$$\mathrm{Im}\, S_k(\lambda_k+i\delta) \approx 1,1\cdot 10^4 c_k^2 [\gamma_k / c_k(T/\theta)],$$

$$\omega_{kj} = (\omega_L/2)\lambda_{kj}; \quad \omega_L = (f(\theta,\ell)/f)^{1/2}\,\omega_{0L},$$

ω_{0L} – максимальная частота в гармоническом приближении: $\omega_{0L}^2 = 8f/M$ /4/).

Выражение (19) при $\theta \gg \omega_D$, согласно расчетам в /4/, имеет вид:

$$\tilde{\tilde{F}}_3(\theta) \approx -N\theta^2 A\,\frac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}, \tag{22a}$$

где $A = (172{,}3/3072) \approx 5{,}6\cdot 10^{-2}$.

Выражение (17) в случае высоких температур, учитывая явный вид (20а), может быть записано в приближенном виде:

$$\epsilon(\theta) = \frac{\theta}{N}\sum_k \frac{1}{2\pi\omega_k}\int_0^\infty \frac{d\omega^2}{\omega^2}\,\omega_k^2\left(1+\frac{\omega^2}{12\theta^2}\right)[-\mathrm{Im}\, G_k(\omega+i\delta)] \approx$$
$$\approx 3\theta\left(\frac{1}{1-\mu\theta\,\dfrac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}} + \frac{1}{24}\,\frac{\omega_L^2}{\theta^2}\right), \tag{23a}$$

где было использовано правило сумм:

$$\frac{1}{2\pi\omega_k}\int_0^\infty d\omega^2[-\mathrm{Im}\, G_k(\omega+i\delta)] = 1 \tag{24}$$

и $\frac{1}{N}\sum_k \omega_k^2 = \omega_L^2/2$. Коэффициент μ в (23а) можно определить, если учитывая (18), воспользоваться эквивалентной записью для (17) в виде:

$$\epsilon(\theta) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{\omega_k}{2}\langle B_k^+ B_k\rangle - \frac{6}{N}\tilde{\tilde{F}}_3(\theta), \tag{17a}$$

где в случае высоких температур, согласно правилу сумм (24), получили:

$$<B_k^+ B_k> = \frac{1}{2\pi\omega_k}\int_0^\infty d\omega^2 \frac{\omega}{\omega_k}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega}{2\theta}\,[-\mathrm{Im}\,G_k(\omega+i\delta)] \approx$$

$$\approx \frac{2\theta}{\omega_k}\left(1+\frac{1}{12}\,\frac{\omega_k^2}{\theta^2}\right).$$

Сравнивая (23а) с (17а) с учетом (22а), приближенно получаем

$$\mu \approx 2A \approx 0{,}11\,.$$

в) Низкие температуры $(\theta \ll \omega_D)$. Приближенное интегрирование в (5) дает:

$$\Pi_k(\omega) = -\omega_k\,\frac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}\left\{\epsilon_0 S_{0k}(\nu) + \frac{3\pi^4}{5}\,\frac{\theta^4}{\omega_D^3}\,S_{1k}(\nu)\right\}, \tag{20в}$$

где безразмерные суммы имеют вид:

$$S_{0k}(\nu) = \frac{1}{(1{,}02)(8)^2}\sum_{p,p'}\frac{(\vec p+\vec p\,'-\vec k)}{\lambda_k^2\lambda_p\lambda_{p'}}\,F^2(-k,p,p')\,\frac{\lambda_p+\lambda_{p'}}{(\lambda_p+\lambda_{p'})^2-\nu^2}\,,$$

(21в)

$$S_{1k}(\nu) = \frac{1}{(120{,}8)(8)^2}\sum_{j_1 j_2}\int_{-1}^{1} d\cos\theta\int_0^{2\pi} d\phi\,\frac{G^2(kj,\phi,\theta,j_1,kj_2)}{\lambda_{kj}^2\lambda_{kj_2}\,d_{j_1}^5(\theta,\phi)}\,\frac{2\lambda_{kj_2}}{\lambda_{kj_2}^2-\nu^2}\,.$$

При выводе этих формул мы воспользовались соотношениями (см.[4]):

$$\epsilon_0 = \frac{1}{N}\sum_k \frac{\omega_k}{2} \approx 1{,}02\,\omega_L\,;\quad \omega_D = \omega_L\left(\frac{36\pi^3}{(8)(120{,}8)}\right)^{1/3} \approx 1{,}05\,\omega_L$$

$$\lambda_{\vec p j_1} \approx p\,d_j(\theta,\phi)\,\frac{d}{2}\quad \text{при}\quad |\vec p| \to 0 \quad \text{и}$$

$$F(\vec k j,\vec p j_1,\vec k j_2) \approx p\,\frac{d}{4}\,G(\vec k j,\theta,\phi,j_1,\vec k j_2)\,.$$

Выражение (19) при $\theta \ll \omega_D$, согласно расчетам в [4], запишем в виде:

$$\tilde{F}_3(\theta \ll \omega_D) \approx -N\epsilon_0\,\frac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}\left\{\epsilon_0 B + \frac{3\pi^4}{5}\,\frac{\theta^4}{\omega_D^3}\,C\right\}, \tag{22в}$$

где

$$B \approx \frac{1{,}481}{(48)(16)(1{,}02)^2} \approx 1{,}85\cdot 10^{-3}\,;\quad C = \frac{7{,}86\,\pi}{(16)(1{,}02)(120{,}8)} \approx 1{,}25\cdot 10^{-2}.$$

Выражение (17) в случае низких температур с учетом явного вида (20в) может быть записано в приближенном виде:

$$\epsilon(\theta) \approx \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{2\pi\omega_k}\int_0^\infty d\omega^2\left\{\frac{\omega_k^2}{2\omega}\left(1+2\sum_{n=1}^\infty e^{-n\frac{\omega}{\theta}}\right)\right\}[-\mathrm{Im}\,G_k(\omega+i\delta)] \approx$$

$$\approx \frac{\epsilon_0}{1-\nu_0\epsilon_0\dfrac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}} + \frac{3\pi^4}{5}\,\frac{\theta^4}{\omega_D^3}\left(1+\nu_1\epsilon_0\,\frac{g^2(\theta,\ell)}{f^3(\theta,\ell)}\right). \tag{23в}$$

Коэффициенты ν_0 и ν_1 в (23в) можно определить, если воспользоваться эквивалентной записью (17а) и вычислить $<B_k^+ B_k>$, представляя спектральную плотность в виде:

$$\frac{1}{2\pi\omega_k}[-\mathrm{Im}\,G_k(\omega+i\delta)] \approx \delta(\omega^2-\epsilon_k^2)+\frac{1}{\pi}\,\frac{2\omega_k\Gamma_k(\omega)}{(\omega^2-\omega_k^2)^2}\,.$$

Однако это разложение некорректно, и поэтому мы выберем коэффициенты ν_0 и ν_1 из условия совпадения результатов для нулевой энергии и теплоемкости, вычисленных на основании формулы (16) в случае малого ангармонизма, с результатами обычной теории возмущения [4]:

$$\nu_0 = 4B \approx 7{,}3\cdot 10^{-3}\,;\quad \nu_1 = 8C = 0{,}10\,.$$

3. Решетка при фиксированном объеме

Для решения самосогласованной системы уравнений необходимо найти явную зависимость силовых постоянных (8) от $\overline{u^2(\ell)}$. Ее можно получить, если задать явный вид потенциала взаимодействия в (11). Как в [2,3], воспользуемся модельным потенциалом Морзе:

$$\phi(R) = D\left[e^{-2a(R-r_0)} - 2e^{-a(R-r_0)}\right]. \tag{25}$$

Заметим, при этом, следуя /7/, что потенциал Ленарда-Джонса

$$\phi_{L-J}(R) = D\left[\left(\frac{r_0}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_0}{R}\right)^{6}\right] \qquad (25a)$$

в области $R - r_0 \ll r_0$ практически не отличается от потенциала Морзе (25), если выбрать $ar_0 = 6$. Поскольку для определения самосогласованного потенциала в (11) необходимо задать лишь производные от потенциала взаимодействия при $R = \ell$, где обычно $\ell - r_0 \lesssim 0{,}3\, r_0$, то результаты, полученные для потенциала Морзе (25), должны мало отличаться от расчетов, основанных на выборе более реалистического потенциала взаимодействия Ленарда-Джонса (25а).

Подставляя (25) в формулу (11) и выполняя суммирование, легко получаем:

$$\tilde{\tilde{\phi}}(\ell) = D\left[e^{-2a(\ell - r_0)}\, e^{2y} - 2\, e^{-a(\ell - r_0)}\, e^{y/2}\right], \qquad (26)$$

где $y = a^2\, \overline{u^2(\ell)}$. В случае фиксированного объема, например, $\ell = r_0 = \mathrm{const}$ для силовых постоянных (8) и давления P (13) получаем:

$$f(\theta, \ell) = \tilde{\tilde{\phi}}''(r_0) = f\,(2e^{2y} - e^{y/2})$$

$$g(\theta, \ell) = \tilde{\tilde{\phi}}'''(r_0) = -fa\,(4e^{2y} - e^{y/2}) \qquad (27)$$

$$P = -\frac{z\ell}{6v}\, \tilde{\tilde{\phi}}'(r_0) = \frac{4ar_0}{v}\, D\,(e^{2y} - e^{y/2}). \qquad (28)$$

где $f = \phi''(r_0) = 2Da^2$ -гармоническая силовая постоянная. Получим выражение для параметра y в случае высоких и низких температур.

3.1. Высокие температуры $(\theta \gg \omega_D)$

Подставляя (27) в (23а), получаем следующее уравнение для определения y:

$$(\lambda_1 y - \beta)(2\, e^{2y} - e^{y/2})\left[1 - A\,\frac{z}{3\lambda_1}\, e^{-2y}\, \frac{(4 - e^{-3/2\, y})^2}{(2 - e^{-3/2\, y})^3}\right] = 1, \qquad (29a)$$

где

$$\lambda_1 = zD/3\theta = 4D/\theta = M\omega_{0L}^2/4a^2\theta; \qquad \beta = (\omega_{0L}^2/24\,\theta^2) \ll 1.$$

Полученное уравнение имеет действительное решение для $y > 0$ во всей области температур (параметра λ_1), т.е. как и в одномерном случае /2/ решетка оказывается устойчивой во всей области температур. Неустойчивость решетки при фиксированном объеме, обнаруженная в /7/, основана на использовании интегрального представления для самосогласованного потенциала (9), которое приводит к появлению неаналитических членов типа $\exp(-1/y)$ в самосогласованном потенциале. Подобные члены описывают процессы туннелирования атомов через потенциальный барьер и для правильной оценки их необходимо учесть наличие твердой сердцевины в потенциале взаимодействия. Поэтому обоснованный вывод об устойчивости решетки при фиксированном объеме может быть сделан только при последовательном учете близкодействующей корреляции атомов, обусловленной наличием твердой сердцевины в потенциале взаимодействия.

В случае малого ангармонизма, когда $\theta \ll D$, параметр $y \ll 1$ и решение уравнения (29а) имеет вид:

$$y = \frac{1}{\lambda_1}\left[1 + \beta + \frac{1}{\lambda_1}\left(3zA - \frac{7}{2}\right)\right]. \qquad (30a)$$

Получаемые с помощью этого решения результаты совпадают с /4,5/. Так, перенормировочная частота и затухание, согласно (20а), и внутренняя энергия с учетом (22а) могут быть записаны в виде:

$$\epsilon_{kj} = \omega_{0kj}\left\{1 + \frac{\theta}{8}\,\frac{h}{f^2}\,(1 + \beta) - \theta\,\frac{g^2}{f^3}\,\mathrm{Re}\, S_{kj}\right\} \qquad (31a)$$

$$\Gamma_{kj} = \theta\,\frac{g^2}{f^3}\,\omega_{0kj}\,\mathrm{Im}\, S_{kj} \qquad (32a)$$

$$\frac{1}{N}E = -\frac{zD}{2} + 3\theta\left\{1 + \beta - \theta\left(\frac{1}{16}\,\frac{h}{f^2} - \frac{A}{3}\,\frac{g^2}{f^3}\right)\right\}, \qquad (33a)$$

где мы ввели $h = \phi^{(4)}(r_0)$; $g = \phi^{(3)}(r_0)$; $\mathrm{Re}\, S_{kj} = \mathrm{Re}\, S_{kj}(\lambda_{kj})$; $\mathrm{Im}\, S_{kj} = \mathrm{Im}\, S_{kj}(\lambda_{kj} + i\delta)$. Теплоемкость $c_v = (k/N)(\partial E/\partial\theta)$ совпадает с первыми членами разложения в /4/. Соотношения (13), (28) позволяют также найти давление:

$$P = \frac{a\ell}{2v}\, 3\theta \{1 + \beta - \theta\left(\frac{9}{56}\frac{h}{f^2} - 2A\frac{g^2}{f^3}\right)\}. \qquad (34а)$$

3.2. Низкие температуры ($\theta \ll \omega_D$)

Подставляя (27) в (23в), получаем следующее уравнение для определения y:

$$\lambda y (2e^{2y} - e^{y/2})^{1/2} \left[1 - \frac{z}{2\lambda}\nu_0 e^{-y}\frac{(4-e^{-3/2\, y})^2}{(2-e^{-3/2\, y})^{5/2}}\right] =$$

$$= 1 + \eta (2e^{2y} - e^{y/2})^{-2}\left[1 + (\nu_1 - \nu_0)\frac{z}{2\lambda} e^{-y}\frac{(4-e^{-3/2\, y})^2}{(2-e^{-3/2\, y})^{5/2}}\right], \qquad (29в)$$

где $\lambda = zD/\epsilon_0^{(0)}$ -безразмерный параметр связи атомов в решетке, $\epsilon_0^{(0)} = 1{,}02\,\omega_{0L}$ - нулевая энергия на атом в гармоническом приближении, $\eta = (3\pi^4/5)(\theta^4/\omega_{0D}^4)$. Как и в случае высоких температур это уравнение имеет действительные решения во всей области значений параметра λ, что совпадает с результатом для одномерной решетки /2/. Однако здесь следует сделать те же замечания по поводу устойчивости решетки, что и приведенные выше для случая высоких температур.

В случае малого ангармонизма $\epsilon_0^{(0)} \ll zD$ и решение уравнения (29в) для $y \ll 1$ дает:

$$y = \frac{1}{\lambda}\{1 + \eta - \frac{1}{\lambda}[(\frac{7}{4} - \frac{9z}{2}\nu_0) + \eta(\frac{21}{2} - \frac{9z}{2}\nu_1)]\}. \qquad (30в)$$

В этом случае перенормированные частоты и затухание, согласно (20в), имеют вид:

$$\epsilon_{kj} = \omega_{0kj}\{1 + \epsilon_0^{(0)}[\frac{1}{24}\frac{h}{f^2}(1+\eta) -$$

$$- \frac{g^2}{f^3}(\mathrm{Re}\, S_{0kj} + \eta\, \mathrm{Re}\, S_{1kj})]\}, \qquad (31в)$$

$$\Gamma_{kj} = \omega_{0kj}\,\epsilon_0^{(0)}\frac{g^2}{f^3}[\mathrm{Im}\, S_{0kj} + \eta\,\mathrm{Im}\, S_{1kj}]. \qquad (32в)$$

Внутренняя энергия (16) с учетом (22в) имеет вид:

$$\frac{1}{N}E = -\frac{zD}{2} + \epsilon_0^{(0)}\{1 + \epsilon_0^{(0)}(\frac{1}{48}\frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3}[5B - \nu_0]) +$$

$$+ \eta[1 - \epsilon_0^{(0)}(\frac{1}{8}\frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3}[\nu_1 - 5C])]\}. \qquad (33в)$$

Как видно, выбор $\nu_0 = 4B$ и $\nu_1 = 8C$ приводит к выражениям для нулевой энергии и теплоемкости $c_v = (k/N)(\partial E/\partial\theta)$, полученным в обычной теории возмущения /4/. Давление (13) можно записать в виде:

$$P(\theta, v) = \frac{a\ell}{2v}\epsilon_0^{(0)}\{1 + \epsilon_0^{(0)}(\frac{1}{84}\frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3}\nu_0) +$$

$$+ \eta[1 - \epsilon_0^{(0)}(\frac{4}{21}\frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3}\nu_1)]\}. \qquad (34в)$$

Как видно, давление (34в) отлично от нуля и при $\theta = 0$ $(\eta = 0)$ за счет учета нулевых колебаний атомов.

4. Решетка при фиксированном давлении

В случае фиксированного давления $P = \mathrm{const}$ объем кристалла или среднее расстояние между атомами ℓ есть функция температуры системы. Рассмотрим случай малого внешнего давления, когда $|\ell - \ell_0| \ll \ell_0$, где ℓ_0 -равновесное расстояние для ближайших соседей при $P = 0$. Согласно (13), для потенциала (26) получаем

$$\ell = \ell_0 - \frac{p}{3a}e^{y}\ ; \quad \ell_0 = r_0 + \frac{3}{2a}y, \qquad (35)$$

где $p = P\frac{3v}{4a\,\ell_0 D}$ - малое безразмерное давление. Силовые постоянные (8) при этом имеют вид:

$$f(\theta,\ell) = \overset{\approx}{\phi}''(\ell) \approx f(e^{-y} + p),$$

$$g(\theta,\ell) = \overset{\approx}{\phi}'''(\ell) \approx g\left(e^{-y} + \frac{7}{9} p\right). \qquad (36)$$

4.1. Высокие температуры ($\theta \gg \omega_D$)

Подставляя (36) в (23а), получаем уравнение для параметра y:

$$(\lambda_1 y - \beta)\left[1 - A \frac{3z}{\lambda_1} e^{y} + p e^{y}\left(1 + A \frac{4z}{3\lambda_1} e^{y}\right)\right] = e^{y}, \qquad (37а)$$

где обозначения те же, что и в (29а). Полученное уравнение имеет действительные решения лишь в области температуры $\theta \ll \theta_c$, где критическая температура:

$$\frac{\theta_c}{D} \approx \frac{z}{(3)(6,7)} \{1 + 2p - 0,15\beta_c\} \approx 0,6\ \{1 + 2p - 0,15\beta_c\}. \qquad (38а)$$

Решение уравнения (37а) при $\tau = (\theta/\theta_c) \leq 1$ имеет вид:

$$y \approx 0,5\ \{1 + 1,6p + 0,3\beta_c - 1,63\sqrt{1-\tau}\}. \qquad (39а)$$

Перенормированная частота колебаний при $\tau \leq 1$ имеет вид:

$$\epsilon_{kj} \approx 0,77\,\omega_{0kj}\{1 + 0,42p + 0,4\sqrt{1-\tau} + 0,16(1-\tau) - 4,5\,\tau\,\mathrm{Re}\,S_{kj}\} \qquad (40а)$$

и при $\theta > \theta_c$ становится комплексной, что означает динамическую неустойчивость системы. Подобный же результат был получен в псевдогармоническом приближении /3/. Затухание колебаний вблизи критической точки равно:

$$\Gamma_{kj} \approx \omega_{0kj}\,\theta \frac{g^2}{f^3} e^{y/2}\,\mathrm{Im}\,S_{kj} \approx 3,5\,\omega_{0kj}\,\mathrm{Im}\,S_{kj} \qquad (41а)$$

и по порядку величины составляет $\Gamma_{kj}/\epsilon_{kj} \approx 0,1$.

Внутренняя энергия при $\theta \leq \theta_c$

$$\frac{1}{N} E \approx -\frac{zD}{2} + 3\theta_c\{1,9 - 0,6p + 0,8\beta_c - 2,1\sqrt{1-\tau} - (1-\tau)\} \qquad (42а)$$

остается конечной, но теплоемкость при постоянном давлении

$$c_p = \frac{k}{N}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}(E + 3PV)\right]_P \approx 3k\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1-\tau}}\right) \qquad (43а)$$

и коэффициент линейного теплового расширения

$$\alpha = \frac{k}{\ell}\left(\frac{\partial\ell}{\partial\theta}\right)_P \approx k \frac{3}{2a\ell\theta_c} \frac{0,4}{\sqrt{1-\tau}} \qquad (44а)$$

неограниченно возрастают при $\theta \to \theta_c$.

В случае малого ангармонизма, когда $\theta \ll D$, параметр $y \ll 1$ и решение уравнения (37а) имеет вид:

$$y \approx \frac{1}{\lambda_1}\left\{1 - p + \beta + \frac{1}{\lambda_1}(1 - 3Az)\right\}. \qquad (45а)$$

Полученные с помощью этого решения выражения для физических величин имеют вид:

$$\epsilon_{kj} \approx \omega_{0kj}\left\{1 + \frac{p}{2} - \theta\left[\frac{1}{28}\frac{h}{f^2}(1+\beta) + \frac{g^2}{f^3}\mathrm{Re}\,S_{kj}\right]\right\}, \qquad (46а)$$

$$\Gamma_{kj} \doteq \omega_{0kj}\frac{g^2}{f^3}\theta\,\mathrm{Im}\,S_{kj}, \qquad (47а)$$

$$\frac{1}{N}E \approx -\frac{zD}{2} + 3\theta\left\{1 - \frac{p}{2} + \beta + \theta\left(\frac{1}{56}\frac{h}{f^2} + \frac{A}{3}\frac{g^2}{f^3}\right)\right\}, \qquad (48а)$$

$$c_p \approx 3k\left\{1 - \beta + \theta\left(\frac{1}{28}\frac{h}{f^2} + \frac{2A}{3}\frac{g^2}{f^3}\right)\right\}, \qquad (49а)$$

$$\alpha \approx k\frac{3}{8a\ell D}\left\{1 - \beta - \frac{11}{9}p + \theta\left(\frac{1}{7}\frac{h}{f^2} + 4A\frac{g^2}{f^3}\right)\right\}. \qquad (50а)$$

4.2. Низкие температуры $(\theta \ll \omega_D)$

Подставляя (36) в (23в), получаем: самосогласованное уравнение для y:

$$\lambda y \left(1 - \frac{9z}{2\lambda} \nu_0 e^{y/2}\right) = e^{y/2} \left\{1 - \frac{p}{2} e^{y} + \eta e^{2y}\left[1 + \frac{9z}{2\lambda}(\nu_0 - \nu_1) e^{y/2}\right]\right\}, \tag{37в}$$

где обозначения те же, что и в (29в). Это уравнение имеет действительные решения для $y > 0$ в области $\lambda \gtrapprox \lambda_0$ и $\theta \lessapprox \theta_c$, где критические параметры имеют значения:

$$\frac{\theta_c}{\omega_{0D}} \approx \frac{1}{2,8\pi} (\lambda - \lambda_0)^{1/4} \approx 0,11 (\lambda - \lambda_0)^{1/4} \; ; \; \lambda_0 \approx 2,2(1 - 1,2p). \tag{38в}$$

Решение при $\theta \lessapprox \theta_c$ имеет вид:

$$y \approx 1,3\{1 + 1,3p - 1,5(\lambda - \lambda_0) - \sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4)}\,[1 - 1,5(\lambda - \lambda_0)] + 4,6(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4)\}. \tag{39в}$$

Перенормированную частоту колебаний при $\tau \lessapprox 1$ можем записать в виде:

$$\epsilon_{kj} \approx 0,52\,\omega_{0kj} \{1 + p + (\lambda - \lambda_0) + 0,65\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4)} - 47 \operatorname{Re} S_{0kj} - 6\cdot 10^2 \operatorname{Re} S_{1kj}\}, \tag{40в}$$

т.е. при $\lambda < \lambda_0$ или $\theta > \theta_c$ она становится комплексной, что означает динамическую неустойчивость системы. Подобный же результат был получен в псевдогармоническом приближении /3/. Затухание колебаний вблизи критической точки равно

$$\Gamma_{kj} \approx \omega_{0kj}\, \epsilon_0^{(0)} \frac{g^2}{f^3} e^{y/2} (\operatorname{Im} S_{0kj} + \eta \operatorname{Im} S_{1kj}) \approx 46\,\omega_{0kj} (\operatorname{Im} S_{0kj} + \eta \operatorname{Im} S_{1kj}) \tag{41в}$$

и по порядку величины составляет $\Gamma_{kj}/\epsilon_{kj} \approx 0,1$.

Внутренняя энергия при $\theta \lessapprox \theta_c$

$$\frac{1}{N} E \approx -\frac{zD}{2} + \epsilon_0^{(0)} \{0,97 - 2,8p + 0,05(\lambda - \lambda_0) + 1,4(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4) - 0,28\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4)}\,[1 + 1,4(\lambda - \lambda_0)]\} \tag{42в}$$

остается конечной. Но теплоемкость при постоянном давлении

$$c_p \approx k \frac{12\pi^4}{5} \frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3} \left\{ \frac{14[1 + 1,4(\lambda - \lambda_0)]}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4)}} - 1,4\cdot 10^2 \right\} \tag{43в}$$

и коэффициент линейного расширения

$$\alpha \approx k \frac{90}{a\ell D} \frac{3\pi^4}{5} \frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3} \left\{ \frac{1 - 1,5(\lambda - \lambda_0)}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1-\tau^4)}} - 9,3 \right\} \tag{44в}$$

неограниченно возрастают при $\theta \to \theta_c$.

В случае малого ангармонизма, когда $\lambda \gg 1$, параметр $y \ll 1$ и решение уравнения (37в) имеет вид:

$$y \approx \frac{1}{\lambda} \left\{1 - \frac{p}{2} + \frac{1}{\lambda}\left(\frac{1}{2} + \frac{9z}{2}\nu_0\right) + \eta\left[1 + \frac{1}{\lambda}\left(3 + \frac{9z}{2}\nu_1\right)\right]\right\}. \tag{45в}$$

Полученные с помощью этого решения выражения для физических величин имеют вид:

$$\epsilon_{kj} \approx \omega_{0kj} \left\{1 + \frac{p}{2} - \epsilon_0^{(0)} \left[\frac{1}{84} \frac{h}{f^2}(1+\eta) + \frac{g^2}{f^3}(\operatorname{Re} S_{0kj} + \eta \operatorname{Re} S_{1kj})\right]\right\}, \tag{46в}$$

$$\Gamma_{kj} \approx \omega_{0kj}\, \epsilon_0^{(0)} \frac{g^2}{f^3} (\operatorname{Im} S_{0kj} + \eta \operatorname{Im} S_{1kj}), \tag{47в}$$

$$\frac{1}{N} E \approx -\frac{zD}{2} + \epsilon_0^{(0)} \left\{1 - \epsilon_0^{(0)}\left[\frac{1}{168} \frac{h}{f^2} + (5B - \nu_0) \frac{g^2}{f^3}\right] + \eta\left[1 + \epsilon_0^{(0)}\left(\frac{1}{28} \frac{h}{f^2} + (\nu_1 - 5C) \frac{g^2}{f^2}\right)\right]\right\}, \tag{48в}$$

$$c_p \approx k\,\frac{12\pi^4}{5}\,\frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3}\,\{1+\epsilon_0^{(0)}[\frac{1}{28}\,\frac{h}{f^2}+(\nu_1-5C)\,\frac{g^2}{f^3}]\}\,, \qquad (49в)$$

$$\alpha \approx k\,\frac{1}{2a\ell D}\,\frac{3\pi^4}{5}\,\frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3}\,\{1+\epsilon_0^{(0)}(\frac{1}{14}\,\frac{h}{f^2}+\nu_1\,\frac{g^2}{f^3})\}\,. \qquad (50в)$$

Выражения (46а)-(50а), (46в)-(50в) описывают поведение ангармонического кристалла при постоянном внешнем давлении вдали от критической точки.

5. Обсуждение

Пользуясь теорией ангармонического кристалла, развитой в /1/, мы рассмотрели поведение трехмерной решетки на примере ГЦК решетки с взаимодействием ближайших соседей. Выбор этой простой модели позволил нам получить аналитические решения для ряда физических величин в широкой области температуры и внешнего давления. Полученные при этом результаты качественно согласуются с предыдущими вычислениями для линейной цепочки /2/ и с расчетами в псевдогармоническом приближении, не учитывающем затухание фононов /3/. В случае малого ангармонизма наши результаты соответствуют вычислениям в рамках обычной теории возмущения /4,5/, которые были нами использованы, чтобы избежать сложных численных расчетов.

Основной особенностью, развитой в теории ангармонического кристалла /1/ (см. также литературу, цитированную в /1/), являются условия самосогласования, которые позволяют рассматривать сильно ангармонические кристаллы и определять точки их динамической неустойчивости. Полученный в разделе 3 вывод об устойчивости решетки в случае фиксированного объема физически может быть объяснен тем, что в этом случае с ростом температуры давление в системе растет (см. (28)), что может приводить к стабилизации системы. Однако при высоких температурах и давлениях большую роль начинают играть короткодействующие корреляции, обусловленные наличием твердой сердцевины в потенциале взаимодействия, которые в развитой теории не учитываются. Роль этих корреляций обсуждается в /7,8/.

В случае малого фиксированного давления среднее расстояние между атомами много больше среднеквадратичных смещений вплоть до критической точки. Согласно результатам раздела 4,

$$\sqrt{\gamma_c} = \frac{\sqrt{\overline{u_c^2}}}{\ell_c} = \frac{\sqrt{y_c}}{a r_0 + \frac{3}{2}\,y_c} \approx \begin{cases} 0{,}10 & \text{при } \theta_c \gg \omega_D \\ 0{,}14 & \text{при } \theta_c \ll \omega_D\,, \end{cases}$$

где $a r_0 = 6$, что соответствует выбору потенциала типа Ленарда-Джонса (25а) (в /2,3/ выбран более "мягкий" потенциал с $a r_0 = 2{,}5$). Поэтому основную роль в этом случае играют дальнодействующие корреляции притяжения, приводящие к фононам в кристалле. Критическая точка при этом соответствует переходу системы из кристаллического состояния в состояние с равномерной плотностью, который сопровождается особенностями в теплоемкости c_p и коэффициенте линейного расширения α (см. (43а), (44а), (43в), (44в) /8/).

Полученные в этой работе значения критических параметров (38а) и (38в) несколько иные, чем в псевдогармоническом приближении /3/:

$$\theta_c^{(ps)}/\theta_c \approx 2{,}5(\theta_c \gg \omega_D)\,; \qquad \lambda_c^{ps}/\lambda_c \approx 0{,}6\,(\theta_c \ll \omega_D)\,,$$

то есть учет процессов распада фононов приводит к уменьшению критической температуры и увеличению критического значения безразмерного параметра связи λ. Значения критических параметров, однако, не зависят от формы потенциала, т.е. выбора величины $a r_0$ в (25). Записывая зависимость приведенной критической температуры $T_c^* = \theta_c / D$ от приведенного давления $P^* = r_0^3 P / D\sqrt{2} \approx 6p$, как в случае классических кристаллов $(\theta_c \gg \omega_D)$, согласно (38а)

$$T_c^* \approx 0{,}6\,(1 + 0{,}3\,P^* - 0{,}15\,\beta_c^0)$$

так и "квантовых" кристаллов $(\theta_c \ll \omega_D)$, согласно (38в),

$$T_c^* \approx \frac{0{,}5}{1-0{,}8P_0^*}\,(P^*-P_0^*)^{1/4}$$

(где $P_0^* \approx (3{,}7-20D/\omega_{0D})$ – давление, соответствующее $T_c^*=0$), находим, что эти уравнения качественно согласуются с приведенными кривыми плавления кристаллов, благородных газов /9/. Это, по-видимому, указывает на близость критической точки к точке плавления, хотя следует учитывать, что плавление является фазовым переходом первого рода, сопровождаемым скачком объема, который не может быть получен из рассмотрения только кристаллической фазы.

Полученные в этой работе результаты основаны на ряде упрощающих предположений, как, например, (10) ,учет взаимодействия только ближайших соседей и др., и поэтому они носят качественный характер. В дальнейшем предполагается исследовать поведение некоторых физических величин, в частности, частоты фононов ϵ_{kj} и их затухания Γ_{kj} в зависимости от температуры и давления на основе численных расчетов для более реальных моделей кристаллов.

В заключение нам хотелось бы поблагодарить д-ра В. Гетце за полезные обсуждения.

Литература

1. N.M.Plakida, T.Siklós. phys.stat.sol., 33, 103 (1969).
2. N.M.Plakida, T.Siklós. phys.stat.sol., 33, 113 (1969).
3. Н.М. Плакида. ФТТ 11, 700 (1969).
4. 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).
5. A.A.Maradudin, A.E.Fein, G.H.Vineyard. phys.stat.sol., 2, 1479 (1962). A.A.Maradudin. phys.stat.sol., 2, 1493 (1962).
6. N.S.Gillis, N.R.Werthamer, T.R.Koehler. Phys.Rev., 165, 951 (1968).

7. Ph.F.Choquard. The Anharmonic Crystal, Benjamin New-York, Amsterdam, 1967.
8. R.H. Brout. Phase Transitions, Benjamin, Inc., New-York, 1965.
9. A. Michels, C.Prins. Physica 28, 101 (1962).

Рукопись поступила в издательский отдел
1 июля 1969 года.