

В. И. ЗУБОВ

**ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ И УСТОЙЧИВОСТЬ
СИЛЬНО АНГАРМОНИЧЕСКОГО КРИСТАЛЛА**

Получено термическое уравнение состояния для кристаллов в случае сильного ангармонизма. Вычисленные с помощью этого уравнения постоянные решеток Ag, K₂ и Xe хорошо согласуются с экспериментальными данными вплоть до температур плавления. Оцениваются температуры, при которых указанные кристаллы теряют устойчивость.

Введение

Ангармонические эффекты играют важную роль в механических и тепловых свойствах кристаллов. При температурах, близких к температуре плавления, они могут оказаться значительными. Это имеет место, например, в кристаллах инертных газов. Учет ангармонических эффектов в динамической теории кристаллических решеток обычно производится по методу теории возмущений [1, 2], что ограничивает рассмотрение областью слабого ангармонизма. В то же время самосогласованные методы остаются справедливыми и в случае сильного ангармонизма. В ряде работ [3—5] сильно ангармонические кристаллы исследовались с помощью псевдогармонической теории самосогласованных фононов.

В работах [6—8] кристаллическое состояние описывалось с помощью одночастичных функций плотности вероятности, каждая из которых отлична от нуля в окрестности соответствующего узла кристаллической решетки; это отражает тот факт, что в кристалле каждая молекула колеблется около определенного узла и вероятность ее перехода в другие узлы мала. Для пространственной части $\omega(\vec{q})$ одночастичных функций использовалось уравнение

$$\ln \{\lambda \omega(\vec{q})\} + \frac{1}{\Theta} \int K(\vec{q} - \vec{q}') \omega(\vec{q}') d\vec{q}' = 0, \quad (1)$$

где

$$K(\vec{q} - \vec{q}') = \sum_{\vec{a}_j \neq 0} \Phi(|\vec{q} - \vec{a}_j - \vec{q}'|), \quad (2)$$

$\Phi(r)$ — парный потенциал межмолекулярного взаимодействия, \vec{a}_j — координаты узлов решетки, \vec{q} и \vec{q}' — отклонение молекул от узлов, λ — нормировочная константа. Решение уравнения (1) имеет вид

$$\omega(\vec{q}) = \frac{1}{\lambda} \exp \left\{ -\frac{u(\vec{q})}{\Theta} \right\} = \frac{1}{\lambda} \exp \left\{ -\frac{1}{\Theta} \sum_{l,m,n \geq 0} \frac{1}{l!m!n!} F_{x^l y^m z^n} q_x^l q_y^m q_z^n \right\}, \quad (3)$$

причем коэффициенты $F_{x^l y^m z^n}$ в случае как угодно сильного ангармонизма удовлетворяют некоторой системе трансцендентных уравнений [8]. Удельная свободная энергия кристалла в приближении уравнения (1) определяется выражением

$$f \equiv \frac{F}{N} = -\Theta \ln \int \exp \left\{ -\frac{1}{\Theta} \left[\frac{p^2}{2m} + u(\vec{q}) \right] \right\} d\vec{p} d\vec{q} - \frac{\bar{u}}{2}. \quad (4)$$

В данной работе рассматривается случай сильного ангармонизма 4-го порядка¹.

§ 1. Термическое уравнение состояния кубического кристалла

С точностью до членов более высокого порядка имеем [7, 8]

$$u(\vec{q}) = u_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F_{\alpha^2} q_{\alpha}^2 + \frac{1}{24} \sum_{\alpha} F_{\alpha^4} q_{\alpha}^4 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha < \beta} F_{\alpha^2 \beta^2} q_{\alpha}^2 q_{\beta}^2, \quad (5)$$

где

$$u_0 = K_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} K_{\alpha^2} \bar{q}_{\alpha}^2 + \frac{1}{24} \sum_{\alpha} K_{\alpha^4} \bar{q}_{\alpha}^4 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha < \beta} K_{\alpha^2 \beta^2} \bar{q}_{\alpha}^2 \bar{q}_{\beta}^2; \quad (6)$$

$$F_{\alpha^2} = K_{\alpha^2} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} K_{\alpha^2 \beta^2} \bar{q}_{\beta}^2; \quad F_{\alpha^2 \beta^2} = K_{\alpha^2 \beta^2} \quad (\alpha, \beta = x, y, z);$$

$$\bar{q}_{\alpha}^2 = \int q_{\alpha}^m q_{\beta}^n \omega(\vec{q}) d\vec{q}; \quad (7)$$

$$K_0 \equiv K(0), \quad K_{\alpha^2} \equiv \left. \frac{\partial^2 K(\vec{q})}{\partial q_{\alpha}^2} \right|_{\vec{q}=0}, \quad K_{\alpha^2 \beta^2} \equiv \left. \frac{\partial^4 K(\vec{q})}{\partial q_{\alpha}^2 \partial q_{\beta}^2} \right|_{\vec{q}=0}. \quad (8)$$

¹ Потенциал взаимодействия двух молекул, находящихся в окрестности разных узлов, можно разложить в ряд Тэйлора по степеням отклонений от соответствующих узлов:

$$\Phi(|\vec{q} - \vec{r}_i - \vec{q}'|) = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k(\vec{q} - \vec{q}'),$$

$$\Phi_k(\vec{q} - \vec{q}') = \frac{1}{k!} \left[(q_x - q'_x) \frac{\partial}{\partial x} + (q_y - q'_y) \frac{\partial}{\partial y} + (q_z - q'_z) \frac{\partial}{\partial z} \right]^k \Phi(|r|) \Big|_{r=\vec{a}_i}.$$

Умножая каждый член ряда на $\omega(\vec{q})\omega(\vec{q}')$ и производя почленное интегрирование (эта операция законна, так как области, в которых одночастичные функции каждой из молекул отличны от нуля, не перекрываются и, следовательно, интегрирование ведется в области равномерной сходимости указанного ряда), получим ряд для средней энергии взаимодействия. Ввиду сходимости полученного ряда, при достаточно больших n n -й остаток

$R_n = \sum_{k=n+1}^{\infty} \bar{\Phi}_k$ является достаточно малым. В случае слабого

ангармонизма это выполняется уже при $n=2$. В данной работе исследуется случай, когда малым является R_4 . Такого рассмотрения достаточно, например, для кристаллов инертных газов вплоть до температур плавления.

Дифференцируя (4) по расстоянию между ближайшими узлами, с учетом (5) и (6), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial a} = & \frac{1}{2} \frac{\partial K_0}{\partial a} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \overline{q_{\alpha}^2} \frac{\partial K_{\alpha^2}}{\partial a} + \frac{1}{24} \sum_{\alpha} \overline{q_{\alpha}^4} \frac{\partial K_{\alpha^4}}{\partial a} + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\alpha < \beta} \overline{q_{\alpha}^2 q_{\beta}^2} \frac{\partial K_{\alpha^2 \beta^2}}{\partial a} + \frac{1}{8} \sum_{\alpha, \beta} \overline{q_{\alpha}^2 q_{\beta}^2} \frac{\partial K_{\alpha^2 \beta^2}}{\partial a}. \end{aligned} \quad (9)$$

Потенциал $u(\vec{q})$ можно представить в форме

$$u(\vec{q}) = u_s(q) + \frac{1}{24} \tilde{K}_4 q^4 (\chi - \bar{\chi}^{(s)}). \quad (10)$$

где $u_s(q) = u_0 + \frac{1}{2} F_2 q^2 + \frac{1}{24} K_4 q^4$ — сферически-симметричная часть $u(\vec{q})$, (11)

$$\chi(\theta, \varphi) = \sin^4 \theta \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi + \sin^2 \theta \cos^2 \varphi, \quad (12)$$

$$\bar{\chi}^{(s)} = \frac{1}{4\pi} \int \chi(\theta, \varphi) d\Omega = \frac{1}{5}; \quad (13)$$

$$F_2 = K_2 + \frac{5}{18} K_4 \overline{q^2}, \quad K_2 = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} K_{\alpha^2}, \quad (14)$$

$$K_4 = \frac{1}{5} \sum_{\alpha, \beta} K_{\alpha^2 \beta^2}, \quad \tilde{K}_4 = \sum_{\alpha, \beta} K_{\alpha^2 \beta^2} \left(1 - \frac{5}{3} \delta_{\alpha\beta} \right).$$

Разлагая в (7) функцию $\omega(\vec{q})$ по степеням $\frac{\tilde{K}_4}{24\theta} q^4 (\chi - \bar{\chi}^{(s)})$, подставляя в (9) и учитывая (14), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial a} = & \frac{1}{2} \frac{\partial K_0}{\partial a} + \frac{1}{2} \frac{\partial K_2}{\partial a} \overline{q^{2(s)}} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{K}_4}{24\theta} \right)^2 \overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)} \times \right. \\ & \times \left. \left(\frac{\overline{q^{10(s)}}}{\overline{q^{2(s)}}} - \overline{q^{8(s)}} \right) - \dots \right] + \frac{1}{24} \frac{\partial K_4}{\partial a} \overline{q^{4(s)}} \times \\ & \times \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{K}_4}{24\theta} \right)^2 \overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)} \left(\frac{\overline{q^{12(s)}}}{\overline{q^{4(s)}}} - \overline{q^{8(s)}} \right) - \dots \right] + \\ & + \frac{5}{72} \frac{\partial K_4}{\partial a} \overline{q^{2(s)}}^2 \left[1 + \left(\frac{\tilde{K}_4}{24\theta} \right)^2 \overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)} \left(\frac{\overline{q^{10(s)}}}{\overline{q^{2(s)}}} - \overline{q^{8(s)}} \right) - \dots \right] - \\ & - \left[\frac{\theta}{2} \overline{q^{8(s)}} \overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)} \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\tilde{K}_4}{24\theta} \right)^2 - \dots \right], \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \overline{q^{2n(s)}} = & \frac{1}{\lambda_s} \int q^{2n} \exp \left\{ -\frac{u_s(q)}{\theta} \right\} d\vec{q} = \\ = & \frac{2\Gamma \left(n + \frac{3}{2} \right)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{12\theta}{K_4} \right)^{\frac{n}{2}} \frac{D_{-(n+1,5)} \left(F_2 \sqrt{\frac{3}{\theta K_4}} \right)}{D_{-1,5} \left(F_2 \sqrt{\frac{3}{\theta K_4}} \right)}. \end{aligned} \quad (16)$$

причем $\bar{q}^{2(s)}$ удовлетворяет трансцендентному уравнению:

$$\bar{q}^{2(s)} = 3 \sqrt{\frac{3\Theta}{K_4}} \frac{D_{-2.5} \left(K_2 \sqrt{\frac{3}{\Theta K_4}} + \frac{5}{6} \bar{q}^{2(s)} \sqrt{\frac{K_4}{3\Theta}} \right)}{D_{-1.5} \left(K_2 \sqrt{\frac{3}{\Theta K_4}} + \frac{5}{6} \bar{q}^{2(s)} \sqrt{\frac{K_4}{3\Theta}} \right)}, \quad (17)$$

где $D_\nu(z)$ — функции Вебера. Пренебрегая в уравнении (15) величинами, зависящими от несферической части потенциала $u(\vec{q})$, и используя свойства функций Вебера [9], получим следующее термическое уравнение состояния¹:

$$\frac{a}{3v} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial K_0}{\partial a} + \frac{\beta\Theta}{2K_2} \frac{\partial K_2}{\partial a} + \frac{\Theta}{4K_4} (3 - \beta) \frac{\partial K_4}{\partial a} \right] = -P, \quad (18)$$

где P — давление, $v \equiv \frac{V}{N}$ — удельный объем, $\beta \equiv \frac{K_2 \bar{q}^{2(s)}}{\Theta}$ в силу (17) решение трансцендентного уравнения

$$\beta = 3K_2 \sqrt{\frac{3}{\Theta K_4}} \frac{D_{-2.5} \left(K_2 \sqrt{\frac{3}{\Theta K_4}} + \frac{2}{\Theta K_2} \beta \sqrt{\frac{\Theta K_4}{3}} \right)}{D_{-1.5} \left(K_2 \sqrt{\frac{3}{\Theta K_4}} + \frac{5}{6K_2} \beta \sqrt{\frac{\Theta K_4}{3}} \right)}. \quad (19)$$

Легко видеть, что

$$\lim \beta = 3, \quad \frac{K_2^2}{\Theta K_4} \rightarrow \infty \quad (20)$$

и следовательно, при низких температурах (18) переходит в термическое уравнение квазигармонического приближения

$$\frac{a}{3v} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial K_0}{\partial a} + \frac{\Theta}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{K_{\alpha^2}} \frac{\partial K_{\alpha^2}}{\partial a} \right] = -P, \quad (21)$$

полученное для системы, одночастичные функции которой подчиняются уравнению (1) в работе [6]. Оно использовано в работах [10—12] для нахождения границы устойчивости некоторых кристаллов.

С помощью термического уравнения состояния (18) можно вычислить расстояние между ближайшими соседями $a = a(\Theta, P)$ кубических кристаллов как в случае слабого, так и сильного ангармонизма 4-го порядка. В следующих параграфах это уравнение применяется к кубическим гранецентрированным кристаллам инертных газов.

§ 2. Тепловое расширение кристаллов инертных газов

Если межмолекулярный потенциал $\Phi(r)$ имеет вид

$$\Phi(r) = \frac{B_1}{r^n} - \frac{B_2}{r^m} \quad (B_1, B_2 > 0; n > m > 3), \quad (22)$$

¹ Оценку отброшенных членов для случая межмолекулярного потенциала Леннард—Джонса см. в § 4.

то после несложных выкладок получим

$$K_0 = \frac{B_1 A_n}{r^n} - \frac{B_2 A_m}{r^m}; \quad (23)$$

$$K_2 = \frac{(n-1)nB_1 A_{n+2}}{3r^{n+2}} - \frac{(m-1)mB_2 A_{m+2}}{3r^{m+2}}; \quad (24)$$

$$K_4 = \frac{(n-1)n(n+1)(n+2)B_1 A_{n+4}}{5r^{n+4}} - \frac{(m-1)m(m+1)(m+2)B_2 A_{m+4}}{5r^{m+4}}, \quad (25)$$

где

$$A_s = \sum_k z_k \left(\frac{a}{R_k} \right)^s \quad (26)$$

решеточные суммы, зависящие от типа решетки и от S , но не зависящие от a ; z_k — координационные числа; R_k — координационные радиусы.

Для описания межатомного взаимодействия в кристаллах инертных газов использовался, как обычно, потенциал Леннард—Джонса (22) с параметрами

$$n = 14, m = 6; B_1 = 4\epsilon_0\sigma^{12}, B_2 = 4\epsilon_0\sigma^6, \quad (27)$$

причем в качестве глубины потенциальной ямы ϵ_0 и «диаметра атомов» σ были взяты величины, определенные из значений второго вириального коэффициента соответствующих газов [13, 14]. При вычислении $a = a(\Theta, P)$ указанных кристаллов с помощью уравнения (18) использовались следующие решеточные суммы кубических гранецентрированных кристаллов [15]:

$$A_6 = 14,454; A_8 = 12,802; A_{10} = 12,311; A_{12} = 12,132; \\ A_{14} = 12,059; A_{16} = 12,027. \quad (26')$$

Уравнение (18) с учетом (23)–(25), (26') и (27) решалось численно. При этом значения $\beta = \beta \left(K_2 \sqrt{\frac{3}{\Theta K_4}} \right)$ вычислялись итерированием уравнения (19) с использованием таблиц функций Вебера [16]. В результате при заданном P и $\Theta \leq \Theta_0(P)$ уравнение (18) имеет два действительных решения $a_1 \leq a_2$, совпадающие лишь при $\Theta = \Theta_0(P)$; при $\Theta > \Theta_0(P)$ уравнение (18) не имеет действительных решений.

В таблицах 1–3 приведены значения $\frac{a_1}{\sigma}$, вычисленные из уравнения (18).

Тепловое расширение Ar

Таблица 1

T°K		10	20	30	40	50	60	70	80	83
$\frac{a_1}{\sigma}$	Уравнение (18)	1,094	1,098	1,102	1,107	1,112	1,117	1,123	1,130	1,132
	Уравнение (21)	1,094	1,098	1,103	1,109	1,116	1,125	1,136	—	—
	Эксперимент [17, 18]	1,101	1,102	1,105	1,108	1,112	1,117	1,123	1,130	1,133

$\epsilon_0/K = 119,8^\circ\text{K}$; $\sigma = 3,405 \cdot 10^{-8}$ см [13]. Прочерки означают отсутствие действительных решений уравнения (21).

Таблица 2

Тепловое расширение Кг

T°K		10	25	40	55	70	85	100	115
a_1 $\bar{\sigma}$	Уравнение (18)	1,093	1,098	1,103	1,108	1,114	1,120	1,127	1,135
	Уравнение (21)	1,093	1,098	1,104	1,111	1,119	1,130	1,160	—
	Эксперимент [19]	1,109	1,111	1,115	1,119	1,125	1,131	1,138	1,146

$\epsilon_0/K=158^\circ\text{K}$, $\sigma=3,60 \cdot 10^{-8}$ см [14].

Таблица 3

Тепловое расширение Хе

T°K		20	40	60	80	100	120	140	160
a_1 $\bar{\sigma}$	Уравнение (18)	1,094	1,099	1,104	1,109	1,115	1,121	1,128	1,136
	Уравнение (21)	1,094	1,099	1,105	1,112	1,121	1,132	—	—
	Эксперимент [20, 21]	1,096	1,099	1,1035	1,109	1,115	1,121	1,128	1,137

$\epsilon_0/K=217^\circ\text{K}$, $\sigma=3,96 \cdot 10^{-8}$ см [14].

ния (18), а также значения $\frac{a_1^{(qh)}}{\sigma}$ в квазигармоническом приближении (21), и соответствующие экспериментальные данные [17—21] для кристаллов Аг, Кг и Хе при нулевом давлении.

Данные для Аг, Кг и Хе, приведенные в таблицах, показывают, что значения a , вычисленные из термического уравнения (18), хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными величинами при не слишком низких температурах. Расхождение вблизи $T=0^\circ\text{K}$ обусловлено нулевыми колебаниями, которые не учитываются классическим уравнением (1). Что касается квазигармонического приближения (21), то расхождение между $a^{(qh)}$ и $a_{\text{эксп}}$ имеет место также вблизи температур плавления.

§ 3. Граница устойчивости кристалла

Как уже отмечалось, изобары $a=a(\Theta, P_{\text{фикс}})$, полученные из термического уравнения состояния (18), имеют по две ветви. Ветвь a_1 соответствует устойчивым состояниям $\left(\frac{\partial P}{\partial a_1}\right)_\Theta < 0$, а ветвь a_2 — неустойчивым $\left(\frac{\partial P}{\partial a_1}\right)_\Theta > 0$. При некоторой температуре $\Theta=\Theta_0(P)$ обе ветви сливаются: $a_1(\Theta_0(P), P)=a_2(\Theta_0(P), P)$; при $\Theta>\Theta_0(P)$ уравнение (18) не имеет действительных решений. Кривая (на P, Θ -диаграмме) $\Theta=\Theta_0(P)$ характерна тем, что в каждой ее точке справедливо соотношение

$$\left(\frac{\partial P}{\partial a}\right)_\Theta = 0, \quad (28)$$

эта кривая есть граница устойчивости кристалла, описываемого термическим уравнением состояния (18). В частности, для кубических границентрированных кристаллов с потенциалом межатомного взаимодействия Леннард—Джонса (22), (27) при нулевом давлении температура потери устойчивости $\Theta_0(0) \approx 1,18 \varepsilon_0$, что превышает экспериментальные температуры плавления $T_{пл}$ кристаллов Ag, Kг и Хе в 1,6—1,7 раза. При $P \neq 0$ также $T_0(P) > T_{пл}(P)$.

В квазигармоническом приближении (21) кривая $\Theta = \Theta_0^{qh}(P)$ при не слишком высоких давлениях близка к экспериментальной кривой плавления [10—12]. Однако при температурах, близких к температуре плавления, ангармонизм очень силен и квазигармоническое приближение неприменимо. Например, для Ag при $P=0$, $T=75^\circ\text{K}$ и $a = a_0^{qh}(75^\circ, 0)$, используя работу [13], а также (24), (25), (27) и (26'), получим $\frac{\Theta K_4}{K_2^2} \approx 0,8$, а квазигармоническое приближение (21) справедливо, со-

гласно (20), лишь при $\frac{\Theta K_4}{K_2^2} \ll 1$. Поэтому близость кривой $\Theta = \Theta^{qh}(P)$ к экспериментальной кривой плавления не может служить основанием для того, чтобы отождествить эти кривые, как это делалось в работах [10—12]. Как указано в работе Плакиды [22], теория плавления не может быть получена из рассмотрения одной кристаллической формы.

§ 4. Обоснование приближения (18)

Оценим члены, зависящие от несферической части потенциала $u(\vec{q})$, которые были отброшены при выводе уравнения (18) из (15). Используя (8), (12), (13), (14), (16), (22), (27), а также таблиц функций Вебера [16], получим, что вплоть до $\Theta = 1,2 \varepsilon_0$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{K}_4}{24\Theta} \right)^2 \frac{\overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)}}{\overline{q^{10(s)}}} \left(\frac{\overline{q^{10(s)}}}{\overline{q^{8(s)}}} - \overline{q^{8(s)}} \right) \ll 2,7 \cdot 10^{-3}; \quad (29)$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{K_4}{24\Theta} \right)^2 \frac{\overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)}}{\overline{q^{12(s)}}} \left(\frac{\overline{q^{12(s)}}}{\overline{q^{8(s)}}} - \overline{q^{8(s)}} \right) \ll 7 \cdot 10^{-3}; \quad (30)$$

$$\frac{\Xi}{2} \frac{\overline{(\chi - \bar{\chi}^{(s)})^2}^{(s)}}{\overline{q^{8(s)}}} \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\tilde{K}_4}{24\Theta} \right)^2 \ll 2,9 \cdot 10^{-3}. \quad (31)$$

$$\frac{\beta\Theta}{2K_2} \frac{\partial K_2}{\partial a} + \frac{\Theta}{4K_4} (3 - \beta) \frac{\partial K_4}{\partial a}$$

Подставляя (29)—(31) в (15), найдем, что вплоть до $\Theta = 1,2 \varepsilon_0$ вклад отброшенных членов не превышает 0,2% от $\frac{\beta\Theta}{2K_2} \frac{\partial K_2}{\partial a} + \frac{\Theta}{4K_4} (3 - \beta) \frac{\partial K_4}{\partial a}$. Таким образом, хотя ангармонический потенциал $u(\vec{q})$ не обладает сферической симметрией, но ввиду быстрого роста $u(\vec{q})$ (а следовательно, быстрого убывания $w(\vec{q})$ (3)) основной вклад в термодинамические функции даже при высоких температурах дает очень малая область ячейки вблизи узла, где потенциал $u(\vec{q})$ почти

сферически симметричен. Приведенные оценки показывают, что переход от (15) к уравнению (18) является обоснованным.

В другой работе при помощи полученных здесь результатов будут вычислены коэффициенты теплового расширения, изотермические сжимаемости и изобарические теплоемкости сильно ангармонических кристаллов инертных газов.

Автор благодарен проф. Я. П. Терлецкому за постоянное внимание к работе и полезные советы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М., ИЛ, 1958.
2. Лейбфрид Г., Людвиг В. Теория ангармонических эффектов в кристаллах. М., ИЛ, 1963.
3. Gilis, Werthamer, Koehler. Phys. Rev., **165**, 951, 1968.
4. Goldman V. V., Horton G. K., Klein M. L. Phys. Rev., Let., **21**, 1527, 1968.
5. Плакида Н. М. «Физика твердого тела», **11**, 700, 1969.
6. Терлецкий Я. П., Зубов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астр., № 5, 53, 1968.
7. Зубов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астр., № 3, 113, 1969.
8. Zubov V. I., Terletsy Ya. P. Ann. Phys., **24**, 97, 1970.
9. Уиттекер Э. Т., Ватсон Дж. Н. Курс современного анализа, II. М., Физматгиз, 1963.
10. Базаров И. П. «Изв. вузов», № 1, 18, 1969.
11. Базаров И. П. «Физика твердого тела», **11**, 840, 1969.
12. Ржевский В. В. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., **11**, 579, 1970.
13. Michel A., Wyker H., Wijker H. K. Physica, **15**, 627, 1949.
14. Newitt D. M. Design of High Pressure and the Properties of Fluids at High Pressure. Oxford, 1940.
15. Jones I., Ingham A. Proc. Roy. Soc., **A 107**, 636, 1925.
16. Карпов К. А., Чистова Э. А. Таблицы функций Вебера, т. III. М., ВЦ АН СССР, 1968.
17. Peterson O. G., Batchelder D. N., Simmons R. O. Phil. Mag., **12**, 1193, 1965.
18. Peterson O. G., Batchelder D. N., Simmons R. O. Phys. Rev., **150**, 703, 1966.
19. Losee D. L., Simmons R. O. Phys. Rev., **172**, 944, 1968.
20. Sears D. R., Klug H. P. J. Chem. Phys., **37**, 3002, 1962.
21. Manzhelii V. G., Gavrilko V. G., Kuchnev V. I. Phys. status solidi, **34**, K55, 1969.
22. Plakida N. M., Siklós T. Phys. stat. sol., **39**, 171, 1970.

Поступила в редакцию
25.1 1971 г.

Кафедра
теоретической физики