ЖЭТФ, 2012, том 141, вып. 3, стр. 530–539

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ СПЕКТРОВ ФОНОНОВ В ОЦК-, ГЦК- И ГПУ-КРИСТАЛЛАХ С КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИМ МЕЖАТОМНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

В. Г. Вакс[*], *И. А. Журавлев*, *А. Д. Заболотский*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Московский физико-технический институт (государственный университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 30 мая 2011 г.

Показано, что частоты фононных ветвей, соответствующих колебаниям плотноупакованных атомных плоскостей, в ОЦК-, ГЦК- или ГПУ-кристаллах с короткодействующим межатомным взаимодействием при каждой поляризации λ описываются универсальным соотношением, содержащим только два параметра для каждой ветви. В ОЦК-кристаллах эти фононные ветви соответствуют направлению $(\xi, \xi, 0)$, в ГЦК-кристаллах — направлению (ξ, ξ, ξ), в ГПУ-кристаллах — направлению $(0, 0, \xi)$. Указанное универсальное соотношение может нарушаться только дальнодействующими взаимодействиями, а именно, взаимодействиями за пределами шестой координационной сферы в ОЦК-кристалле, пятой координационной сферы в ГЦК-кристалле и одиннадцатой или десятой координационной сферы в ГПУ-кристалле. Влияние этих дальнодействий для каждой из обсуждаемых фононных ветвей можно количественно характеризовать некоторыми параметрами $\Delta_{n\lambda}$, просто выражающимися через частоты трех фононов данной ветви. Приведены значения этих параметров для всех ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-металлов, для которых измерялись фононные спектры. Найдено, что в значительном большинстве случаев обсуждаемые соотношения для частот выполняются с точностью порядка нескольких процентов. В тех же случаях, когда параметры $\Delta_{n\lambda}$ не малы, их значения могут давать существенную информацию о типе и масштабе эффектов дальнодействия в различных металлах.

1. ВВЕДЕНИЕ

Характеристики фононных спектров $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ в твердых телах и их аномалии в некоторых металлах широко обсуждаются в литературе, см., например, [1]. Феноменологическое описание спектров $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ дается обычно с использованием матриц Борна–Кармана $A_n^{\alpha\beta}$ [2], каждая из которых отвечает вкладу в силовые постоянные от взаимодействий n-х соседей в кристалле. Если для хорошего описания $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ достаточно использовать только небольшое число матриц $\mathbf{A}_n$, то межатомные взаимодействия называют короткодействующими. Если это не так, то говорят о проявлении эффектов дальнодействия, и для объяснения этих эффектов развиваются различные теоретические модели [1]. Принято считать, что для большинства металлов спектры $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ в целом неплохо описываются моделями Борна–Кармана с короткодействием. Для ОЦК- и ГЦК-металлов это соответствует учету взаимодействий в пределах пяти–шести координационных сфер, а для ГПУ-металлов — в пределах шести–восьми координационных сфер [1, 3, 4].

В этом сообщении мы обращаем внимание на то, что в ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-кристаллах с короткодействующими взаимодействиями, точное определение которых дано в разд. 2, частоты фононных ветвей, соответствующих продольным и поперечным колебаниям плотноупакованных атомных плоскостей, описываются простым и универсальным соотношением, даваемым ниже формулой (11), которое содержит только два параметра для каждой ветви. Поэтому

[*] E-mail: vaks@mbslab.kiae.ru

спектр всех фононов данной ветви полностью определяется частотами только двух фононов этой ветви. Для ОЦК-кристалла эти ветви соответствуют направлению $(\xi,\xi,0)$, для ГЦК-кристалла — направлению (ξ,ξ,ξ), а для ГПУ-кристалла — направлению $(0,0,\xi)$ в зоне Бриллюэна, т. е. соответствуют одним из наиболее симметричных типов колебаний.

Влияние дальнодействующих взаимодействий, нарушающих обсуждаемые универсальные соотношения, для каждой ветви можно характеризовать некоторыми параметрами $\Delta_{n\lambda}$, определенными ниже равенствами (15). В разд. 3 приводятся наблюдаемые значения этих параметров для всех ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-металлов, для которых известны результаты измерений фононных спектров, а в разд. 4 обсуждаются эти значения. Мы показываем, что в значительном большинстве случаев обсуждаемые соотношения для частот выполняются с точностью порядка нескольких процентов. В тех же случаях, когда параметры $\Delta_{n\lambda}$ не малы, их значения могут давать существенную информацию о типе и масштабе эффектов дальнодействия в различных металлах.

2. СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ ЧАСТОТАМИ КОЛЕБАНИЙ ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ АТОМНЫХ ПЛОСКОСТЕЙ

Ниже мы рассмотрим колебания плотноупакованных атомных плоскостей и обозначим вектор относительного смещения двух таких соседних плоскостей в каждой структуре как $\mathbf{h}$. Для краткости, ОЦК-структуру будем отмечать индексом α, ГЦК-структуру — индексом γ, а ГПУ-структуру — индексом ε (как это принято для таких структур в железе), и период вдоль главной оси k в ОЦК-решетке будем обозначать как $\mathbf{a}_{k\alpha}$, в ГЦК-решетке — как $\mathbf{a}_{k\gamma}$, а период вдоль гексагональной оси c в ГПУ-решетке — как $\mathbf{c}$. Тогда вектор относительного смещения соседних плотноупакованных плоскостей, обозначаемый ниже как $\mathbf{h}$, для каждой из этих структур можно записать так:

$$\mathbf{h}_\alpha = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_{1\alpha}+\mathbf{a}_{2\alpha}), \quad \mathbf{h}_\gamma = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_{1\gamma}+\mathbf{a}_{2\gamma}+\mathbf{a}_{3\gamma}), \quad \mathbf{h}_\varepsilon = \frac{1}{2}\mathbf{c}. \tag{1}$$

Если обозначить p-й вектор решетки в n-й координационной сфере атома как $\mathbf{R}_{np}$, то каждый такой вектор можно записывать в виде суммы его «поперечной» части $\mathbf{r}_{np}$, перпендикулярной вектору $\mathbf{h}$, и «продольной» части $\mathbf{H}_{np} = m\mathbf{h}$, где m — номер плотноупакованной плоскости, в которой лежит вектор $\mathbf{R}_{np}$:

$$\mathbf{R}_{np} = \mathbf{r}_{np} + \mathbf{H}_{np} = \mathbf{r}_{np} + m\mathbf{h}. \tag{2}$$

Волновые векторы $\mathbf{k}$, которые для обсуждаемых нами колебаний параллельны векторам $\mathbf{h}$, будем описывать безразмерным параметром ξ, равным отношению компонент вектора $\mathbf{k}$ к длине соответствующего вектора обратной решетки:

$$\mathbf{k}_\alpha = (\xi,\xi,0)2\pi/a_\alpha, \quad \mathbf{k}_\gamma = (\xi,\xi,\xi)2\pi/a_\gamma, \quad \mathbf{k}_\varepsilon = (0,0,\xi)4\pi/c. \tag{3}$$

Здесь a_α или a_γ — постоянная ОЦК- или ГЦК-решетки, а значения ξ меняются в интервале $0 < \xi < 0.5$. В теории колебаний кристаллов фононные ветви с волновыми векторами $\mathbf{k}_\alpha$, $\mathbf{k}_\gamma$ и $\mathbf{k}_\varepsilon$ в формуле (3) обозначаются соответственно как Σ, Λ и Δ [1], и для поляризации λ эти ветви будут обозначаться ниже как Σ-λ, Λ-λ или Δ-λ, например: Σ-T1, Λ-L и т. п. Заметим также, что для ГПУ-решетки определение ξ в формуле (3) отличается множителем $(1/2)$ от аналогичного параметра ξ_ε, обычно используемого в литературе [1]: $\xi = \xi_\varepsilon/2$. Однако ниже показано, что при рассмотрении колебаний плотноупакованных плоскостей определение ξ в формуле (3) для $\mathbf{k}_\varepsilon$ является более удобным и позволяет единым образом описывать эти колебания во всех трех обсуждаемых структурах.

Для простоты рассмотрим сначала ОЦК- и ГЦК-кристаллы, в которых имеется только один атом в элементарной ячейке. При этом изменение энергии U при произвольных малых смещениях атомов $\mathbf{u_r}$ из положений равновесия $\mathbf{r}$ выражается через матрицы силовых постоянных $A^{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ таким образом [2]:

$$\delta U = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} A^{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')u^\alpha_{\mathbf{r}}u^\beta_{\mathbf{r}'}, \tag{4}$$

где α и β — декартовы индексы. Динамическая матрица $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, собственные значения которой $\nu_{\lambda\mathbf{k}}$ связаны с частотами фононов $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ соотношением $\nu_{\lambda\mathbf{k}} = M\omega^2_\lambda(\mathbf{k})$, есть фурье-компонента от матрицы силовых постоянных $A^{\alpha\beta}(\mathbf{R})$, входящей в равенство (4), и эту динамическую матрицу можно записать в виде суммы вкладов от векторов решетки $\mathbf{R}_{np}$, принадлежащих разным координационным сферам $n \neq 0$:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} A^{\alpha\beta}(\mathbf{R})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) = \sum_{n=1}^{n_{max}}\sum_p A^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{np})[\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{np}) - 1]. \tag{5}$$

Здесь через n_{max} обозначен номер последней из учитываемых координационных сфер и учтено, что при $\mathbf{k} = 0$ динамическая матрица должна обращаться в нуль вследствие трансляционной инвариантности взаимодействий [2].

Для обсуждаемых фононов с волновыми векторами $\mathbf{k}$, даваемыми формулой (3), динамическую матрицу (5) с учетом равенств (2) можно записать так:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{m=-m_{max}}^{m_{max}} A_m^{\alpha\beta}[\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{h}m) - 1]. \quad (6)$$

Здесь через m_{max} обозначен номер последней из учитываемых плотноупакованных плоскостей, а через $A_m^{\alpha\beta}$ обозначена сумма матриц силовых постоянных $A^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{np})$ по всем значениям поперечных компонент $\mathbf{r}_{np}$, которые соответствуют векторам $\mathbf{R}_{np}$ с одним и тем же значением продольной компоненты $\mathbf{H}_{np}$:

$$A_m^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{r}_{np}} A^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{np})\Big|_{\mathbf{H}_{np}=m\mathbf{h}}. \quad (7)$$

Отметим, что матрицы $A_m^{\alpha\beta}$ в формулах (6) и (7) четны по m: $A_m^{\alpha\beta} = A_{-m}^{\alpha\beta}$; это следует из четности по $\mathbf{R}$ матрицы силовых постоянных $A^{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ в рассматриваемых центросимметричных кристаллах. Поэтому динамическую матрицу (6) для обсуждаемых фононных ветвей можно компактно записать в таком виде:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{m=1}^{m_{max}} B_m^{\alpha\beta}\sin^2(\pi m\xi), \quad (8)$$

где для краткости обозначено $B_m^{\alpha\beta} = -4A_m^{\alpha\beta}$ и учтены соотношения (1) и (3).

С учетом кристаллической симметрии, динамические матрицы (8) для фононных ветвей (3) имеют такой вид:

$$\mathbf{D}_\alpha = \begin{pmatrix} a & c & 0 \\ c & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_\gamma = \begin{pmatrix} a & b & b \\ b & a & b \\ b & b & a \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Если собственные значения $M\omega^2$ этих матриц для поляризации λ обозначить как ν_λ, то для направления $\Sigma = (\xi,\xi,0)$ в ОЦК-кристалле поперечной поляризации T1 вдоль направления (1,$\bar{1}$,0) соответствует значение $\nu_{T1} = a - c$, поперечной поляризации T2 вдоль оси (0,0,1) — значение $\nu_{T2} = b$, а продольной поляризации L — значение $\nu_L = a + c$. В ГЦК-кристалле для продольной и поперечной ветвей направления $\Lambda = (\xi,\xi,\xi)$ имеем $\nu_L = a + 2b$, $\nu_T = a - b$. Таким образом, для всех обсуждаемых ветвей квадраты частот $\omega_\lambda^2(\mathbf{k})$ являются линейной комбинацией элементов динамической матрицы. И поскольку зависимость каждого из этих элементов от компонент волнового вектора ξ дается выражением (8), такой же является эта зависимость и для квадратов частот $\omega_\lambda^2(\xi)$:

$$\omega_\lambda^2(\xi) = \sum_{m=1}^{m_{max}} B_{m\lambda}\sin^2(\pi m\xi). \quad (10)$$

Соотношения (8)–(10) показывают, что задача о колебаниях плотноупакованных атомных плоскостей при любой поляризации λ оказывается формально эквивалентной задаче о колебаниях линейной цепочки атомов, и число разных эффективных силовых постоянных $B_{m\lambda}$ в формуле (10) равно числу плоскостей m_{max} («соседей в цепочке»), взаимодействие с которыми учитывается в используемой модели взаимодействий.

Заметим теперь, что вследствие плотноупакованного характера обсуждаемых структур уже относительно небольшие значения номера m_{max} последней из учитываемых плоскостей в формулах (5), (8) и (10) соответствуют учету взаимодействий достаточно удаленных соседей в кристалле. Так, для ОЦК-структуры выбор $m_{max} = 2$ включает взаимодействия во всех координационных сферах n вплоть до $n_{max} = 6$ (т. е. взаимодействия с N_{tot} =64 соседями), а для ГЦК-структуры — вплоть до $n_{max} = 5$ (т. е. с $N_{tot} = 80$ соседями). Для ГПУ-кристаллов при гексагональном отношении $c/a > 1.581$ (что соответствует 15 из существующих 22 ГПУ-металлов) выбор $m_{max} = 2$ соответствует значению $n_{max} = 11$ (т. е. $N_{tot} = 118$), а при $c/a > 1.581$ — значению $n_{max} = 10$ (т. е. $N_{tot} = 94$) [3]. Такие или меньшие значения n_{max} используются в большинстве обычно применяемых описаний фононных спектров параметрами Борна–Кармана [1].

Если выбрать $m_{max} = 2$, то зависимости $\omega_\lambda^2(\xi)$ в формулах (10) принимают следующий универсальный вид:

$$\omega_\lambda^2(\xi) = c_{1\lambda}\sin^2\pi\xi + c_{2\lambda}\sin^2 2\pi\xi, \quad (11)$$

где значения $c_{1\lambda}$ и $c_{2\lambda}$ для каждой ветви можно выразить через частоты любых двух фононов этой ветви. В качестве двух таких частот можно выбрать, например, их значения для $\xi = 1/6$ и $\xi = 1/3$ или $\xi = 1/2$, т. е. вблизи начала и вблизи середины или конца ветви. Для краткости будем обозначать эти частоты соответственно как $\omega_{6\lambda}$, $\omega_{3\lambda}$ и $\omega_{2\lambda}$. Тогда равенство (11) может быть записано в таких двух эквивалентных формах:

$$\omega_\lambda^2(\xi) = 2\left(\omega_{3\lambda}^2 - \omega_{6\lambda}^2\right)\sin^2\pi\xi + \\ + 2\left(\omega_{6\lambda}^2 - \frac{\omega_{3\lambda}^2}{3}\right)\sin^2 2\pi\xi, \quad (12)$$

$$\omega_\lambda^2(\xi) = \omega_{2\lambda}^2 \sin^2\pi\xi + \frac{1}{3}\left(4\omega_{6\lambda}^2 - \omega_{2\lambda}^2\right)\sin^2 2\pi\xi. \quad (13)$$

Соотношения (11)–(13) могут нарушаться только дальнодействующими взаимодействиями, которые соответствуют расстояниям, бо́льшим или равным трем межплоскостным расстояниям h. Чтобы характеризовать влияние этих дальнодействий на обсуждаемые колебания, можно вводить различные параметры, описывающие отклонения наблюдаемых фононных частот от соотношений (11)–(13). Если эти соотношения выполнены, то между частотами $\omega_{6\lambda}$, $\omega_{3\lambda}$ и $\omega_{2\lambda}$ существует простая связь:

$$\omega_{3\lambda}^2 = \omega_{6\lambda}^2 + \frac{1}{2}\,\omega_{2\lambda}^2. \quad (14)$$

Поэтому можно ввести два безразмерных параметра, $\Delta_{3\lambda}$ и $\Delta_{2\lambda}$, которые могут характеризовать влияние дальнодействий, нарушающих равенства (11)–(14), соответственно, на «среднюю» часть ветви вблизи $\xi = 1/3$ и на ее «конечную» часть вблизи $\xi = 1/2$:

$$\Delta_{3\lambda} = 1 - \frac{\omega_{6\lambda}^2 + \omega_{2\lambda}^2/2}{\omega_{3\lambda}^2}, \\ \Delta_{2\lambda} = 1 - \frac{2(\omega_{3\lambda}^2 - \omega_{6\lambda}^2)}{\omega_{2\lambda}^2}. \quad (15)$$

Значения параметров $\Delta_{n\lambda}$ в различных металлах обсуждаются ниже.

Отметим, что соотношения вида (10) могут быть выписаны для колебаний не только плотноупакованных, но и других плоскостей высокой симметрии, например, колебаний плоскостей (1,0,0) в ОЦК- и ГЦК-кристаллах. Однако для этих не плотноупакованных плоскостей значения m_{max} в сумме (10), необходимые для адекватного описания взаимодействий, должны быть гораздо большими, чем для плотноупакованных плоскостей. Вследствие этого число неизвестных параметров $B_{m\lambda}$ в формуле (10) или параметров $c_{m\lambda}$ в формулах, аналогичных (11), становится весьма большим. Поэтому простота и универсальность соотношений (11)–(15) для аналогичных соотношений, описывающих колебания не плотноупакованных атомных плоскостей, отсутствуют.

Обобщим соотношения (5)–(15) на случай ГПУ-структуры. В этом случае кристалл содержит два атома в элементарной ячейке, динамическая матрица является матрицей шестого порядка, и для волновых векторов $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\varepsilon$ в формуле (3), параллельных вектору смещения плоскостей $\mathbf{h} = \mathbf{h}_\varepsilon$ в формуле (1), эта матрица вместо (9) имеет такой вид (см., например, [4]):

$$\mathbf{D}_\varepsilon = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & c & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & d \\ c & 0 & 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где каждую из величин a, b, c, d можно записать в виде суммы вкладов различных плоскостей m, аналогичном выражению (6):

$$a = \sum_{m=-m_{max}}^{m_{max}} a_m \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{h}m), \\ b = \sum_{m=-m_{max}}^{m_{max}} b_m \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{h}m), \quad (17)$$

$$c = \sum_{m=-m_{max}}^{m_{max}} c_m \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{h}m), \\ d = \sum_{m=-m_{max}}^{m_{max}} d_m \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{h}m). \quad (18)$$

При этом, как показано в работе [4], в равенствах (17) для a и b суммы по m включают только четные значения m, а в равенствах (18) для c и d — только нечетные m. Заметим, что величины a_m, b_m, c_m и d_m в этих равенствах четны по m, так же как в случае аналогичных выражений (7). Правда, для не центро-симметричной ГПУ-решетки матрица силовых постоянных, вообще говоря, содержит также слагаемые, антисимметричные относительно отражения $\mathbf{R} \to (-\mathbf{R})$ (которые описываются последним слагаемым формулы (2) в работе [3] или формулы (5) в работе [4]). Однако после суммирования по всем поперечным компонентам $\mathbf{r}_{np}$ в суммах, аналогичных такой же сумме в формуле (7), эти антисимметричные слагаемые исчезают. Отметим также, что вектор $\mathbf{k}$ в равенствах (17) и (18) лежит в первой зоне Бриллюэна ГПУ-решетки, т. е. описывается выражением $\mathbf{k}_\varepsilon$ в формуле (3) с $0 \le \xi \le 1/4$.

Собственные значения ν динамической матрицы (16) для поперечных и продольных фононов равны соответственно $(a{\pm}c)$ и $(b{\pm}d)$. При этом знак «плюс» соответствует акустической ветви колебаний, а знак «минус» — оптической, что будет указываться ниже индексом a или o у величины ν. Для упрощения формул ниже рассматривается только случай $m_{max} = 2$ в равенствах (17) и (18). Тогда, учитывая также трансляционную инвариантность, т. е. необходимость обращения в нуль частот акустических ветвей при $\xi = 0$, собственные значения ν матрицы (16) для каждой поляризации λ, поперечной или продольной, можно записать в следующем виде:

$$\nu_{a\lambda} = a_\lambda(1 - \cos 4\pi\xi) + c_\lambda(1 - \cos 2\pi\xi), \qquad (19)$$

$$\nu_{o\lambda} = a_\lambda(1 - \cos 4\pi\xi) + c_\lambda(1 + \cos 2\pi\xi), \qquad (20)$$

где коэффициенты a_λ и c_λ связаны с величинами a_m, b_m, c_m и d_m в равенствах (17) и (18) таким образом:

$$\begin{aligned} a_T &= -2a_2, \quad c_T = -2c_1, \\ a_L &= -2b_2, \quad c_L = -2d_1. \end{aligned} \qquad (21)$$

Выше отмечено, что если волновой вектор $\mathbf{k}$ в формулах (17) и (18) лежит в первой зоне Бриллюэна ГПУ-решетки, то значение ξ в формулах (19) и (20) следует считать лежащим между 0 и 1/4. В то же время разделение рассматриваемых колебаний на акустическую и оптическую ветви, описываемое формулами (19) и (20), является искусственным, и в точке $\xi = 1/4$ эти ветви гладко переходят друг в друга. Это искусственное разделение можно обычным образом устранить, если рассматривать оптическую ветвь не в первой, а во второй зоне Бриллюэна (см., например, [5]), т. е. ввести в формуле (20) вместо ξ переменную $\xi' = 1/2 - \xi$, которая при изменении ξ между 0 и 1/4 меняется между 1/4 и 1/2. Таким образом, равенство (20) принимает вид

$$\nu_{o\lambda} = a_\lambda(1 - \cos 4\pi\xi') + c_\lambda(1 - \cos 2\pi\xi'), \qquad (22)$$

и уравнения (19) и (22) описывают единую функцию, даваемую правой частью равенства (19) с аргументом ξ, меняющимся между 0 и 1/2. Видно, что зависимость частот ω_λ этой ветви от ξ дается тем же соотношением (11), что для аналогичных ветвей в ОЦК- и ГЦК-кристаллах. Поэтому все обсуждавшиеся соотношения (12)–(15) справедливы и для колебаний плотноупакованных плоскостей в ГПУ-кристаллах. Нужно только иметь в виду, что при обычном описании фононов в этих кристаллах с разделением ветвей на акустические и оптические и использованием в выражении (3) для $\mathbf{k}_\varepsilon$ вместо ξ переменной $\xi_\varepsilon = 2\xi$ частоты $\omega_{6\lambda}$, $\omega_{3\lambda}$, и $\omega_{2\lambda}$ в равенствах (12)–(15) для ГПУ-кристаллов определяются так:

$$\begin{gathered} \omega_{6\lambda} = \omega_{a\lambda}(\xi_\varepsilon = 1/3), \quad \omega_{3\lambda} = \omega_{o\lambda}(\xi_\varepsilon = 1/3), \\ \omega_{2\lambda} = \omega_{o\lambda}(\xi_\varepsilon = 0). \end{gathered} \qquad (23)$$

3. ПАРАМЕТРЫ ВЛИЯНИЯ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЙ НА КОЛЕБАНИЯ ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ ПЛОСКОСТЕЙ В РАЗЛИЧНЫХ МЕТАЛЛАХ

Чтобы количественно характеризовать влияние дальнодействий, приводящих к отклонениям от равенства (14), на частоты обсуждаемых фононных ветвей, в табл. 1–3 мы приводим наблюдаемые значения параметров $\Delta_{3\lambda}$ и $\Delta_{2\lambda}$ в соотношениях (15) для всех ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-металлов, для которых нам известны результаты измерений фононных спектров. Статистическая ошибка измерений $\delta_{n\lambda}$ в этих параметрах вычислялась по обычной формуле для такой ошибки в функции нескольких независимых переменных [6]:

$$\delta_{n\lambda} = \left[\sum_{m=6,3,2} \left(\partial\Delta_{n\lambda}/\partial\omega_{m\lambda}\right)^2 \left(\delta\omega_{m\lambda}\right)^2\right]^{1/2}. \qquad (24)$$

В выражении (24) функции $\Delta_{n\lambda}(\omega_{m\lambda})$ определены равенствами (15), производные вычисляются при средних значениях частот $\omega_{m\lambda}$, приводимых в цитируемых экспериментальных работах, а $\delta\omega_{m\lambda}$ — ошибки измерений $\omega_{m\lambda}$, указанные в этих работах. В тех случаях, когда эти ошибки в используемых работах не указывались, мы оценивали их из разброса или размера экспериментальных точек. Если частоты $\omega_\lambda(\xi)$ для $\xi = 1/6$, $\xi = 1/3$ или $\xi = 1/2$ в цитируемых экспериментах не измерялись, их значения вычислялись с использованием линейной интерполяции по ξ между ближайшими измеренными значениями $\omega_\lambda(\xi)$. Значения $\Delta_{n\lambda}$ и $\delta_{n\lambda}$ в табл. 1–3 приводятся с точностью до процента, и в тех случаях, когда полученное $\Delta_{n\lambda}$ оказывается меньшим ошибки $\delta_{n\lambda}$, это значение $\Delta_{n\lambda}$ в табл. 1–3 положено равным нулю.

Для удобства дальнейших обсуждений в табл. 4 мы приводим также классификацию всех исследовавшихся металлов по значениям максимальных параметров дальнодействия $|\Delta_{n\lambda}^{max}|$. При этом эффекты дальнодействия, описываемые значениями $|\Delta_{n\lambda}^{max}| \le 0.1$, мы для краткости ниже будем называть слабыми; эффекты, соответствующие $0.1 < |\Delta_{n\lambda}^{max}| \le 0.2$ — заметными, а эффекты с $0.2 < |\Delta_{n\lambda}^{max}|$ — сильными.

Таблица 1. Параметры влияния дальнодействий на колебания плотноупакованных плоскостей $\Delta_{n\lambda}$, определенные формулами (15), и статистические ошибки их измерений $\delta_{n\lambda}$, определенные формулой (24), для фононов направления $\Sigma = (\xi, \xi, 0)$ в ОЦК-металлах при различных поляризациях λ

Металл		Li	Na	K	Rb	Ba	Sr	Zr	V	Nb	Ta	Cr	Mo	W	Fe	Fe
Температура, K		293	90	9	120	295	930	1423	296	296	296	300	296	296	295	773
$\lambda = \mathrm{T1}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	0	0		0	0	0	−15	12	10	–	0	0	−5	0	0
	$\delta_{3\lambda}$, %	±16	±9		±20	±12	±21	±5	±12	±4	–	±4	±5	±3	±3	±11
	$\Delta_{2\lambda}$, %	0	0		0	0	0	15	−20	−15	–	0	0	7	0	0
	$\delta_{2\lambda}$, %	±17	±11		±24	±17	±21	±4	±18	±5	–	±4	±5	±3	±4	±11
$\lambda = \mathrm{T2}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	0	0	0	0	0	0	−51	0	−14	−9	17	19	17	0	0
	$\delta_{3\lambda}$, %	±8	±5	±6	±7	±6	±9	±7	±16	±8	±4	±4	±4	±3	±2	±9
	$\Delta_{2\lambda}$, %	0	0	0	0	0	0	42	0	14	11	−33	−35	−30	0	0
	$\delta_{2\lambda}$, %	±9	±6	±7	±8	±7	±10	±3	±19	±5	±4	±8	±7	±5	±3	±9
$\lambda = \mathrm{L}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	0	0	0	0	0	0	18	0	0	0	0	0	0	6	0
	$\delta_{3\lambda}$, %	±8	±4	±5	±5	±7	±9	±3	±7	±5	±5	±3	±4	±6	±2	±6
	$\Delta_{2\lambda}$, %	0	0	0	0	0	0	−37	0	0	0	0	0	0	−10	0
	$\delta_{2\lambda}$, %	±10	±6	±5	±6	±8	±11	±5	±10	±6	±7	±4	±4	±6	±4	±8
Источник для $\omega_\lambda(\mathbf{k})$		[1]	[1]	[1]	[1]	[7]	[8]	[9]	[10]	[11]	[12]	[1]	[1]	[1]	[13]	[14]

Таблица 2. То же, что в табл. 1, но для фононов направления $\Lambda = (\xi, \xi, \xi)$ в ГЦК-металлах

Металл		Al	Pb	Cu	Ag	Au	Fe	Co-0.08Fe	Ni	Pd	Pt	Ce	Th
Температура, K		300	100	296	293	296	1428	297	296	296	90	295	296
$\lambda = \mathrm{T}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	8	0	0	0	0	0	6	0	0	−7	20	4
	$\delta_{3\lambda}$, %	±1	±8	±6	±23	±5	±4	±4	±4	±5	±4	±6	±3
	$\Delta_{2\lambda}$, %	−15	0	0	0	0	0	−10	0	0	9	−64	−7
	$\delta_{2\lambda}$, %	±2	±9	±6	±21	±6	±6	±6	±4	±6	±4	±20	±5
$\lambda = \mathrm{L}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	2	−9	0	0	0	14	7	0	0	0	0	−5
	$\delta_{3\lambda}$, %	±2	±4	±4	±19	±4	±5	±3	±5	±5	±2	±8	±4
	$\Delta_{2\lambda}$,%	−4	15	0	0	0	−30	−12	0	0	0	0	7
	$\delta_{2\lambda}$, %	±2	±5	±5	±20	±5	±9	±7	±6	±6	±3	±10	±5
Источник для $\omega_\lambda(\mathbf{k})$		[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[15]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]

4. ТОЧНОСТЬ ВЫПОЛНЕНИЯ УНИВЕРСАЛЬНЫХ СООТНОШЕНИЙ (11)–(13) ДЛЯ РАЗНЫХ ФОНОННЫХ ВЕТВЕЙ В РАЗЛИЧНЫХ МЕТАЛЛАХ

В этом разделе мы обсудим точность выполнения соотношений (11)–(13), т. е. отсутствие или наличие заметных эффектов дальнодействия в различных металлах. При этом мы не будем подробно обсуждать физическую природу этих эффектов дальнодействия, поскольку такое рассмотрение выходит за рамки настоящей работы, а обсуждению этих проблем посвящена очень большая специальная литература, например, [1, 5, 7, 24, 27]. Вместо этого мы постараемся дать общую классификацию знаков и масштаба параметров дальнодействия $\Delta_{n\lambda}$ для металлов различного типа, уделяя основное внимание тем особенностям эффектов дальнодействия, описываемых этими параметрами, которые ранее подробно не обсуждались.

Начнем с обсуждения металлов, указанных во

Таблица 3. То же, что в табл. 1 и 2, но для фононов направления $\Delta = (0,0,\xi)$ в ГПУ-металлах

Металл		Be	Mg	Zn	Cd	Tl	Sc	Y	Ti	Zr	Hf	Tc	Re	Ru	Co	Tb	Ho	Lu
Температура, K		80	290	80	77	296	295	295	295	295	295	295	295	295	295	295	295	295
$\lambda = \mathrm{T}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	0	11	-4	-4	0	5	0	0	-8	0	-15	0	0	0	0	-7	4
	$\delta_{3\lambda}$, %	±1	±6	±2	±0.5	±15	±3	±5	±5	±3	±13	±5	±8	±3	±7	±8	±7	±1
	$\Delta_{2\lambda}$, %	0	-19	7	7	0	-8	0	0	11	0	22	0	0	0	0	0	-6
	$\delta_{2\lambda}$, %	±2	±10	±2	±1	±13	±4	±5	±8	±3	±17	±4	±10	±3	±9	±10	±7	±2
$\lambda = \mathrm{L}$	$\Delta_{3\lambda}$, %	-5	0	0	0	-16	-3	0	11	0	25	35	23	-19	7	0	0	0
	$\delta_{3\lambda}$, %	±1	±2	±1	±1	±7	±1	±3	±5	±4	±6	±2	±4	±2	±6	±5	±6	±1
	$\Delta_{2\lambda}$, %	8	0	0	0	19	5	0	-27	-7	-67	-196	-99	29	-14	0	0	1
	$\delta_{2\lambda}$, %	±1	±2	±1	±1	±5	±1	±3	±9	±5	±17	±11	±18	±2	±10	±5	±8	±1
Источник для $\omega_\lambda(\mathbf{k})$		[17]	[18]	[19]	[20]	[21]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[1]	[24]	[5]	[1]	[1]	[23]

Таблица 4. Классификация исследованных 43 металлов по масштабу максимальных параметров дальнодействия $\Delta_{n\lambda}^{max}$

Интервал $\lvert\Delta_{n\lambda}^{max}\rvert$	ОЦК	ГЦК	ГПУ	Всего металлов	Доля
$\lvert\Delta_{n\lambda}^{max}\rvert < \delta_{n\lambda}$	Li, Na, K, Rb, Ba, Sr	Cu, Ag, Au, Ni, Pd	Y, Tb	13	30 %
$0.07 \le \lvert\Delta_{n\lambda}^{max}\rvert \le 0.1$	Fe	Pt,Th	Be, Zn, Cd, Sc, Ho, Lu	9	21 %
$0.1 < \lvert\Delta_{n\lambda}^{max}\rvert \le 0.2$	V, Nb, Ta	Al, Pb, Co-0.08Fe	Mg, Tl, Zr, Co	10	23 %
$0.2 < \lvert\Delta_{n\lambda}^{max}\rvert \le 0.3$	W	Fe	Ti, Ru	4	9 %
$0.3 < \lvert\Delta_{n\lambda}^{max}\rvert$	Zr, Cr, Mo	Ce	Hf, Tc, Re	7	16 %

второй и третьей строках табл. 4, для которых обсуждаемые эффекты дальнодействия либо находятся в пределах ошибок измерений, либо малы. В этих металлах отклонения рассматриваемых частот от значений, следующих из соотношений (11)–(13), не превышают 5 % и с такой точностью частоты $\omega_\lambda(\xi)$ могут рассчитываться по этим соотношениям. Согласно табл. 4, к этой группе относится примерно половина из исследованных 43 металлов. Таким образом, если для щелочных металлов Li, Na, K и Rb малость эффектов дальнодействия естественно связать с общей малостью зонных эффектов в этих металлах, то для ОЦК-бария зонные эффекты не малы и приводят, в частности, к такой необычной особенности фононных спектров, как инверсия взаимного положения продольной и поперечной ветвей для направления $\Delta = (\xi,0,0)$: частоты продольных фононов здесь лежат ниже, чем частоты поперечных [7]. Однако эти зонные эффекты являются, видимо, короткодействующими, и для обсуждаемого нами направления $\Sigma = (\xi,\xi,0)$ эффекты дальнодействий в ОЦК-барии не обнаружены. Малость таких эффектов в Cu, Ag, Au, Ni, Pd и Pt тоже естественно связать с относительной слабостью зонных эффектов в этих металлах. Отметим, однако, что в тех случаях, когда частоты фононов измерены с высокой точностью и экспериментальные ошибки малы, как в работах [18], [19] и [20] для Be, Zn и Cd, значения параметров дальнодействия $\Delta_{n\lambda}$ могут давать не только качественную, но и количественную информацию о связи этих параметров с особенностями структуры металла. Так, для бериллия, у которого гексагональное отношение $c/a = 1.58$ меньше идеального значения $(c/a)_{id} = \sqrt{8/3} = 1.63$, отличное от нуля значение $\Delta_{2\lambda} \approx 0.08$ наблюдается только для продольной ветви $\lambda = \mathrm{L}$ и не наблюдается в поперечной ветви с $\lambda = \mathrm{T}$. В то же время для Zn и Cd с большими c/a, равными 1.86 и 1.89, значения параметра дальнодействия того же порядка, $\Delta_{2\lambda} \approx 0.07$, наблюдаются, напротив, для поперечной ветви $\lambda = \mathrm{T}$ и отсутствуют для продольной ветви с $\lambda = L$. Отметим также, что в ОЦК-железе некоторые слабые эффекты дальнодействий наблюдались в продольной ветви Σ-L только при комнатной температуре $T = 295$ K, а при повышенной температуре $T = 773$ K (так же как при $T = 1043$ K и $T = 1173$ K [14]) эти эффекты уже лежат в пределах экспериментальных ошибок. Таким образом, приближение к точке ферромагнитного перехода, $T_c = 1041$ K, в ОЦК-железе, по-видимому, не сопровождается заметным усилением эффектов дальнодействия.

Рассмотрим теперь металлы, указанные в трех последних строках табл. 4, в которых эффекты дальнодействий являются заметными или сильными. Отметим, во-первых, что включение в эту группу Mg и Tl не является бесспорным, поскольку для этих металлов экспериментальные ошибки, оцененные нами из данных работ [18] и [21], могут быть занижены: эти данные имеют заметный разброс. Поэтому для Mg и Tl желательны дальнейшие, более точные измерения частот ветвей Δ-L и Δ-T. Для Al и Pb наличие сильных дальнодействующих взаимодействий (не менее, чем седьмых–восьмых соседей) обсуждалось многими авторами [1]. При этом отмечалось, что дальнодействия здесь обусловлены наличием в динамической матрице ряда коновских аномалий и соответствующих им осцилляций Фриделя во взаимодействиях, которые в этих поливалентных металлах влияют на фононы намного сильнее, чем в одно- и двухвалентных металлах, см., например, [25]. В ГЦК-Co-0.08Fe заметные отклонения от соотношений (11)–(13) наблюдаются только в конце продольной ветви Δ, т. е. вблизи точки L зоны Бриллюэна [1], так что вне этой области спектры могут хорошо описываться формулой (12). Заметим, что в работе [26], в которой при $T = 884$ K изучались фононные спектры чистого ГЦК-кобальта, эффекты смягчения в точке L частот как продольных, так и поперечных фононов имеют тот же масштаб, что указан в табл. 2 для Co-0.08Fe. Однако детальные данные о значениях и ошибках измерений этих частот в работе [26] не приводятся, поэтому в табл. 2 мы используем такие данные для Co-0.08Fe из работы [1]. Отметим также, что для всех ГЦК-металлов в табл. 3 (включая и Ce с очень большим значением $|\Delta_{n\lambda}^{max}|$) эффекты дальнодействий оказываются заметными не более чем в одной ветви колебаний: только в поперечной ветви для Al и Ce, и только в продольной ветви для Pb, Co-0.08Fe и ГЦК-железе, в то время как для другой ветви отклонения от соотношений (11)–(13) во всех этих металлах являются слабыми.

В переходных ГПУ-металлах Zr, Co, Ti, Ru, Hf, Tc, Re эффекты смягчения продольной ветви Δ-L и их связь с дальнодействующими взаимодействиями электронов обсуждались многими авторами [1, 5, 24]. В работе [5] показано, что для всех названных металлов, кроме Ru, эти эффекты можно успешно описать в рамках простой феноменологической модели дипольных флуктуаций заряда (dipolar fluctuation model — DFM), содержащей небольшое число параметров, в которой смягчение ветви Δ-L объясняется тенденцией системы к образованию волны зарядовой плотности. При этом масштаб обсуждаемого смягчения меняется от слабого в Zr до очень сильного в Hf, Tc, и Re, в зависимости от степени близости системы к точке обсуждаемой неустойчивости. Описание в данной модели Ru, где зависимость $\omega_L(\xi)$ носит более сложный характер [1], требует введения в модель DFM дополнительных параметров [5]. Однако в недавней работе [24] фононы в Ru были успешно описаны полностью «из первых принципов», без введения феноменологических параметров, и было отмечено, что эффективные взаимодействия здесь имеют очень большой радиус действия.

В модели DFM эффекты дальнодействия проявляются только для продольной ветви Δ-L. Согласно табл. 3, это имеет место для Co, Ti, Ru, Hf и Re. В то же время эффекты смягчения поперечной ветви Δ-T, наблюдаемые в Tc при $\xi \sim 0.4$ (в наших обозначениях), моделью DFM не описываются [5]. В табл. 3 это смягчение соответствует заметным отрицательным значениям Δ_{3T} и положительным Δ_{2T} для Tc. При этом табл. 3 показывает, что аналогичное (хотя и примерно вдвое более слабое) смягчение ветви Δ-T происходит и в ГПУ-цирконии, являющемся достаточно близким соседом Tc в таблице Менделеева. Это замечание показывает, что рассмотрение параметров $\Delta_{n\lambda}$, введенных в настоящей работе, позволяет выявлять не только очевидные качественные, но и более тонкие, количественные проявления эффектов дальнодействия.

Аномалии фононных спектров в переходных ОЦК-металлах пятой и шестой групп, V, Nb, Ta и Cr, Mo, W, связанные с наличием очень сильных эффектов дальнодействия, также обсуждались многими авторами [1, 27]. Основные качественные черты этих аномалий были воспроизведены в модели, предложенной в работе [27], в которой влияние короткодействий описывалось феноменологическими параметрами, а дальнодействующие взаимодействия рассчитывались методом сильной связи. Снова отметим, что в Cr, Mo и W рассматриваемые эффекты дальнодействия, хотя и являются очень сильными, но согласно табл. 1, проявляются только в ветви T2 и отсутствуют в двух других ветвях, T1 и L. Поэтому эти другие ветви можно описывать формулами (11)–(13). В то же время в V, Nb и Ta обсуждаемые эффекты малы только в продольной ветви L, а в ветвях T1 и T2 их масштаб, согласно табл. 1, является немалым и сходным, хотя в обычных обсуждениях [1, 27] влияние зонных эффектов на ветвь T2 считается много более сильным, чем на ветвь T1.

В ГЦК-железе при $T = 1428$ К сильные эффекты дальнодействий проявляются в резком смягчении продольных фононов ветви Λ-L вблизи ее конца, точки L. Как отмечено выше, это является типичным проявлением зонных эффектов дальнодействия. Отметим также, что из экспериментальных данных работы [15] можно предположить наличие аналогичного, хотя и меньшего по масштабу, смягчения и в поперечной ветви Λ-T, однако разброс экспериментальных точек не позволяет сделать такой вывод с определенностью. Все эти эффекты могут быть связаны с близостью ГЦК-железа при $T = 1428$ К к точке структурного перехода в ОЦК-фазу, происходящего при $T = 1184$ К, хотя, как отмечено выше, в ОЦК-железе вплоть до $T = 1173$ К подобные эффекты не проявляются [14].

Для ГЦК-церия резкое смягчение поперечной ветви Λ-T вблизи точки L принято связывать с проявлением близости к точке изоструктурного фазового перехода [1], наблюдаемого под давлением и обусловленного, видимо, резким изменением электронной структуры. В ОЦК-цирконии при $T = 1428$ К сильные аномалии фононных спектров проявляются не только в резком смягчении частоты продольной ветви Σ-L вблизи ее конца, точки N, но и в весьма необычных, почти линейных, зависимостях от волнового вектора ξ частот обеих поперечных ветвей, $\omega_{T1}(\xi)$ и $\omega_{T2}(\xi)$ [9]. При этом для ветви T2 эта зависимость кажется даже «вогнутой», т. е. соответствует положительной кривизне, вместо обычных, «выпуклых» функций $\omega_\lambda(\xi)$ с отрицательной кривизной. Эти аномалии принято связывать с близостью ОЦК-циркония к точкам структурных фазовых переходов, прежде всего, к точкам перехода в ω-фазу (наблюдаемого под давлением или при сплавлении ОЦК-циркония с другими элементами [9]), а также к точке перехода в ГПУ-фазу, происходящего при $T = 1135$ К. Отметим еще, что ОЦК-цирконий и ГПУ-технеций являются в табл. 1–3 единственными двумя металлами, в которых обсуждаемые эффекты дальнодействия являются не слабыми во всех ветвях колебаний, как поперечных, так и продольных.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение перечислим основные результаты настоящей работы. Мы замечаем, что в ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-кристаллах с короткодействующими взаимодействиями, которые лежат в пределах соответственно шести, пяти и одиннадцати или десяти координационных сфер, частоты фононных ветвей, соответствующих продольным и поперечным колебаниям плотноупакованных атомных плоскостей, описываются универсальным соотношением (11), содержащим только два параметра для каждой ветви. В ОЦК-, ГЦК- или ГПУ-кристалле эти ветви соответствуют направлению $(\xi, \xi, 0)$, (ξ, ξ, ξ), или $(0, 0, \xi)$ в зоне Бриллюэна и, согласно равенству (11), частоты $\omega_\lambda(\xi)$ всех фононов каждой из этих ветвей при данной поляризации λ полностью определяются частотами только двух фононов на этой ветви. Как показано в разд. 2, в качестве таких двух частот удобно выбирать их значения для $\xi = 1/6$ и $\xi = 1/3$ или $\xi = 1/2$, т. е. вблизи начала и вблизи середины или конца ветви, обозначая эти частоты соответственно как $\omega_{6\lambda}$, $\omega_{3\lambda}$ и $\omega_{2\lambda}$. Тогда равенство (11) можно записать в двух эквивалентных формах, (12) и (13), и соотношения (11)–(13) могут нарушаться только дальнодействующими взаимодействиями за пределами указанных выше шестой, пятой и одиннадцатой или десятой координационной сферы.

Влияние дальнодействующих взаимодействий, нарушающих обсуждаемые универсальные соотношения, для каждой ветви удобно характеризовать параметрами $\Delta_{n\lambda}$, которые просто выражаются через частоты трех фононов данной ветви по равенствам (15). В табл. 1–3 мы приводим значения этих параметров для всех ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-металлов, для которых нам известны измерения фононных спектров. Анализ этих значений показывает, что примерно в половине исследованных металлов параметры $\Delta_{n\lambda}$ малы для всех обсуждаемых фононных ветвей, и частоты фононов этих ветвей можно рассчитывать по соотношениям (11)–(13) с точностью не менее 5 %. В остальных же металлах заметные или сильные отклонения от соотношений (11)–(13) наблюдаются обычно только в какой-то одной из ветвей, поперечной или продольной, в то время как для другой ветви (или других ветвей) эти отклонения остаются малыми. Показано также, что в тех случаях, когда параметры $\Delta_{n\lambda}$ не малы или когда их значения измерены достаточно точно, эти значения могут давать существенную информацию о типе и масштабе эффектов дальнодействия в различных металлах и об изменении этих эффектов от металла к металлу.

Авторы глубоко благодарны Ю. Нейхаузу за подробную информацию о результатах работы [14], существенно использованную в настоящей статье; П. А. Коржавому за помощь в работе, А. С. Иванову за ценные замечания; а также ИТЦ «Аусферр», Магнитогорск за финансовую поддержку этой работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-02-00563); в рамках программы поддержки ведущих научных школ РФ (гранты №№ НШ-3004.2008.2, НШ-7235.2010.2) и программы развития научного потенциала высшей школы РФ (грант № 2.1.1/4540).

ЛИТЕРАТУРА

1. H. R. Schober and P. H. Dederichs, in: Landolt-Börnstein, Vol. 13 A, Metals, Springer, Berlin (1981), p. 1.

2. М. Борн, Хуан Кунь, *Динамика кристаллических решеток в гармоническом приближении*, Изд-во иностр. лит., Москва (1958).

3. V. G. Vaks and K. Yu. Khromov, Phys. Rev. B **75**, 212103 (2007).

4. В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов, ЖЭТФ **133**, 571 (2008).

5. N. Wakabayashi, R. H. Scherm, and H. G. Smith, Phys. Rev. B **25**, 5122 (1982).

6. Д. Худсон, *Статистика для физиков*, Мир, Москва (1970).

7. J. Mizuki, Y. Chen, K.-M. Ho, and C. Stassis, Phys. Rev. B **32**, 666 (1985).

8. J. Mizuki and C. Stassis, Phys. Rev. B **32**, 8372 (1985), Phys. Rev. B **35**, 872 (1987).

9. C. Stassis, J. Zaretsky, and N. Wakabayashi, Phys. Rev. Lett. **41**, 1726 (1978).

10. R. Collela and B. W. Batterman, Phys. Rev. B **1**, 3913 (1970).

11. B. M. Powell, P. Martel, and A. D. B. Woods, Can. J. Phys. **55**, 1601 (1977).

12. A. D. B. Woods, Phys. Rev. **136**, A 781 (1964).

13. C. Van Dijk and J. Bergsma, in: *Neutron Inelastic Scattering*, IAEA, Vienna (1968), Vol. 1, p. 233.

14. J. Neuhaus, W. Petry, and A. Krimmel, Physica B **234–236**, 897 (1997).

15. J. Zaretsky and C. Stassis, Phys. Rev. B **35**, 4500 (1987).

16. C. Stassis, T. Gould, O. D. McMasters, K. A. Gschneidner, and R. M. Nicklow, Phys. Rev. B **19**, 5746 (1979).

17. R. Stedman, Z. Amilius, R. Pauli, and O. Sundin, J. Phys. F: Metal Phys. **6**, 157 (1976).

18. R. Pynn and G. L. Squires, Proc. Roy. Soc. London **A326**, 347 (1972).

19. L. Almquist and R. Stedman, J. Phys. F: Metal Phys. **1**, 785 (1971).

20. A. A. Chernyshov, V. V. Pushkarev, A. Yu. Rumyantsev, R. B. Dorner, and R. Pynn, J. Phys. F: Metal Phys. **9**, 1983 (1979); **11**, 365 (1980).

21. T. G. Worlton and R. E. Schmunk, Phys. Rev. B **3**, 4115 (1971).

22. C. Stassis, D. Arch, J. Zaretsky, and O. D. McMasters, Phys. Rev. B **24**, 730 (1981).

23. J. Pleschiutschnig, O. Blaschko, and W. Reichardt, Phys. Rev. B **41**, 975 (1990).

24. R. Heid, L. Pintschovius, W. Reichardt, and K.-P. Bohnen, Phys. Rev. B **61**, 12059 (2000).

25. В. Г. Вакс, *Межатомные взаимодействия и связь в твердых телах*, ИздАТ, Москва (2002), Гл. 13.

26. B. Straus, F. Frey, W. Petry, J. Trampenau, K. Nicolaus, S. M. Shapiro, and J. Bossy, Phys. Rev. B **54**, 6035 (1996).

27. C. M. Varma and W. Weber, Phys. Rev. B **19**, 6142 (1979).