

ПОСТРОЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ ГПУ-КРИСТАЛЛА НА ОСНОВЕ ДАННЫХ О ФОНОНАХ В ТОЧКАХ СИММЕТРИИ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА И О МОДУЛЯХ УПРУГОСТИ

В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 июня 2007 г.

Даны общие аналитические выражения для динамической матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ и модулей упругости C_{ik} в ГПУ-кристалле через параметры Борна–Кармана. Предложен аналитический метод построения $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ на основе данных о частотах фононов в точках симметрии зоны Бриллюэна $\omega_i(N)$ и о модулях C_{ik} . Указан ряд соотношений между значениями $\omega_i(N)$ и C_{ik} для обычно используемых моделей взаимодействий. Показано, что обычный метод определения параметров Борна–Кармана из их подгонки к экспериментальным фононным спектрам в ГПУ-кристаллах, как правило, неоднозначен, а предлагаемый аналитический подход позволяет найти все решения данной задачи. Разработанные методы иллюстрируются построением динамических матриц для Tb, Sc, Ti и Co.

PACS: 62.20.D-, 63.20.-e

1. ВВЕДЕНИЕ

Описание динамических матриц кристаллов в терминах силовых постоянных Борна–Кармана (БК) [1] широко используется в физике твердых тел. На основе таких матриц рассчитываются, например, фононные вклады в термодинамические свойства [2–9]; исследуются смещения атомов вокруг дефектов кристаллической решетки [10]; вычисляются «деформационные» взаимодействия атомов внедрения или замещения в сплавах, связанные с искажениями кристаллической решетки вблизи этих атомов [10–13], и т. д. При этом силовые постоянные описываются матрицами, элементы которых пропорциональны параметрам БК, и эти параметры оцениваются из экспериментальных данных о фононных спектрах при том или ином числе учитываемых координационных сфер n . Для ГЦК- и ОЦК-металлов эти методы хорошо разработаны и описаны, например, в работах [2, 14].

В то же время для ГПУ-кристаллов, в частности, ГПУ-металлов, проблема построения интерполяции БК для динамической матрицы освещена в литературе намного менее полно. В общей и точной поста-

новке, которую принято называть общей тензорной (general tensor forces — GTF) моделью, задача построения динамической матрицы на основе параметров БК здесь обсуждалась лишь немногими авторами и весьма кратко [4, 5, 15], и общие аналитические выражения для динамической матрицы и модулей упругости ГПУ-кристаллов через параметры БК в литературе отсутствуют. В большинстве же работ, например, [3], используются упрощенные модели, такие как аксиально-симметричная (AS) или модифицированная аксиально-симметричная (MAS) модели. В то же время физических оснований для использования AS- или MAS-моделей нет [2], и ряд наблюдаемых особенностей фононов в ГПУ-металлах в рамках этих моделей не описывается [4, 16]. Не обсуждались «соотношения связи» между частотами фононов в различных точках зоны Бриллюэна и модулями упругости, возникающие в используемых моделях БК, в то время как экспериментальная проверка таких соотношений может служить критерием адекватности этих моделей. Отсутствуют попытки количественного анализа проблемы «дальнодействия» в силовых постоянных, хотя качественно эти вопросы обсуждались рядом авторов, например, в работах [15, 17] и т. д.

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

Для построения динамической матрицы на основе измерений фононных частот ω_i обычно используется метод подгонки к этим ω_i параметров БК выбранной модели по методу наименьшего квадратичного отклонения χ^2 . В то же время, как отмечалось рядом авторов [18], этот метод не однозначен, поскольку возможно (и для ГПУ-кристаллов, как показано ниже, обычно имеет место) наличие нескольких существенно разных динамических матриц $\mathbf{D}^m(\mathbf{k})$ с близкими значениями частот ω_i и отклонений χ^2 , особенно если частоты ω_i измерены в не слишком большом числе направлений зоны Бриллюэна. Тогда те физические свойства, которые зависят не только от частот, но и от самих динамических матриц, например, деформационное взаимодействие в сплаве или распределение деформаций вблизи дефекта кристалла, для разных матриц $\mathbf{D}^m(\mathbf{k})$ будут существенно разными. Поэтому проблема возможной неоднозначности решений данной задачи важна и для приложений результатов измерений фононных спектров к исследованиям сплавов и дефектов решетки.

В настоящей работе динамическую матрицу ГПУ-кристалла предлагается строить аналитически на основе данных о модулях упругости C_{ik} и о частотах фононов $\omega_i(N)$ в точках N симметрии зоны Бриллюэна. При этом учитывается, что модули C_{ik} обычно известны с высокой точностью [19], что в точках симметрии N частоты ω_i обычно измеряются точнее, чем в других точках зоны Бриллюэна, и что общая структура фононного спектра в основном определяется именно значениями частот $\omega_i(N)$. В то же время значения C_{ik} и $\omega_i(N)$ связаны с параметрами БК аналитическими уравнениями, что позволяет просто находить из этих уравнений параметры БК. При этом наличие аналитических решений вместо подгонки по методу наименьших квадратов позволяет просто решать отмеченную проблему неоднозначности, т. е. находить все решения данной задачи. Этот подход, очевидно, можно и обобщать, например, включая в используемые экспериментальные данные значения частот ω_i и на направлениях симметрии зоны Бриллюэна, где они также выражаются через параметры БК аналитически [20].

В разд. 2 мы приводим общее ковариантное выражение для матриц силовых постоянных ГПУ-кристалла. В разд. 3 дается явное выражение динамической матрицы через параметры БК, иллюстрируемое на примере модели взаимодействий восьми ближайших соседей. В разд. 4 и 5 приводятся явные выражения для элементов динамической матрицы в точках симметрии зоны Бриллюэна и для модулей

упругости через параметры БК. В разд. 6 указаны два простых соотношения между модулями упругости и частотами оптических фононов в точках A и Γ , справедливые при учете всех взаимодействий до одиннадцатых соседей включительно. В разд. 7 описаны методы решения полученных уравнений для параметров БК. В разд. 8 развитые методы иллюстрируются построением динамических матриц для Tb , Sc , Ti и Co . Основные выводы приводятся в Заключение.

2. ОБЩЕЕ КОВАРИАНТНОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ МАТРИЦ СИЛОВЫХ ПОСТОЯННЫХ ГПУ-КРИСТАЛЛА

Обозначим период ГПУ-решетки вдоль гексагональной оси z как \mathbf{c} и будем обозначать компоненту вектора решетки \mathbf{R} вдоль оси z символом \mathbf{H} , а компоненту \mathbf{R} в базовой плоскости (x, y) — символом \mathbf{r} : $\mathbf{R} = \mathbf{r} + \mathbf{H}$. Атомные плоскости (подрешетки) со значениями векторов $\mathbf{H} = n\mathbf{c}$ и $\mathbf{H} = (n\mathbf{c} + \mathbf{h})$, где $\mathbf{h} = \mathbf{c}/2$ есть вектор относительного смещения соседних базовых плоскостей, будем обозначать, соответственно, символами A и B . Поперечные компоненты \mathbf{r} удобно выражать через три периода \mathbf{b}_s в плоскости (x, y) , равные \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и $\mathbf{b}_3 = -(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$, и через три их линейные комбинации \mathbf{d}_s , определенные равенствами

$$\mathbf{d}_s = \frac{\mathbf{b}_{s+1} - \mathbf{b}_{s+2}}{3}, \quad (1)$$

где индекс s у векторов \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s определен по модулю три: $s + 2 = s - 1$. Значения поперечных компонент \mathbf{r} для атомов в подрешетках A и B можно записывать как $\mathbf{r}_A = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2$ и $\mathbf{r}_B = \mathbf{r}_A + \mathbf{d}_s$, где m_1 и m_2 — целые числа. Отметим полезные для дальнейшего соотношения для скалярных произведений векторов \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s друг на друга:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_s \cdot \mathbf{b}_{s\pm 1} &= -a^2/2, & \mathbf{d}_s^2 &= a^2/3, \\ \mathbf{d}_s \cdot \mathbf{d}_{s\pm 1} &= -a^2/6, & & \\ \mathbf{d}_s \cdot \mathbf{b}_{s\pm 1} &= \pm a^2/2, & \mathbf{b}_s \cdot \mathbf{d}_s &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где $a = |\mathbf{b}_s|$ — постоянная ГПУ-решетки в базовой плоскости (x, y) .

Будем выбирать оси x и y так же, как в работе [20], направляя ось x по вектору \mathbf{b}_1 , а ось y — по \mathbf{d}_1 . Тогда декартовы компоненты \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s имеют такие значения:

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_1 &= a(1, 0, 0), & \mathbf{b}_2 &= a(-1, \sqrt{3}, 0)/2, \\
\mathbf{b}_3 &= a(-1, -\sqrt{3}, 0)/2, \\
\mathbf{d}_1 &= a(0, 1, 0)/\sqrt{3}, & \mathbf{d}_2 &= -a(\sqrt{3}, 1, 0)/2\sqrt{3}, \\
\mathbf{d}_3 &= a(\sqrt{3}, -1, 0)/2\sqrt{3}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Для матриц силовых постоянных мы рассматриваем общие тензорные выражения, обсуждавшимся в работе [4], но используем ковариантное описание. Обозначим p -й вектор в n -й координационной сфере атома («в звезде n ») как \mathbf{R}_{np} и запишем его в виде суммы поперечной и продольной компонент:

$$\mathbf{R}_{np} = \mathbf{r}_{np} + \mathbf{H}_{np}. \tag{4}$$

Трехрядную матрицу силовых постоянных $A_{np}^{\alpha\beta} = A_n^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{np})$, описывающую вклад в динамическую матрицу взаимодействий атомов с относительным смещением \mathbf{R}_{np} , записываем в виде, явно учитывающем симметрию ГПУ-решетки:

$$\begin{aligned}
A_{np}^{\alpha\beta} &= a_n n_p^\alpha n_p^\beta + b_n \delta_{\alpha\beta}^\perp + c_n \delta_{\alpha\beta}^{zz} + \\
&+ d_n (n_p^\alpha n_p^{z\beta} + n_p^{z\alpha} n_p^\beta) + e_n \varepsilon_{\alpha\beta}^\perp I_p,
\end{aligned} \tag{5}$$

где скалярные величины a_n, b_n, c_n, d_n и e_n являются параметрами БК. Через \mathbf{n}_p или \mathbf{n}_p^z в формуле (5) обозначен единичный вектор направления \mathbf{r}_{np} или \mathbf{H}_{np} :

$$\mathbf{n}_p = \mathbf{r}_{np}/r_n, \quad \mathbf{n}_p^z = \mathbf{H}_{np}/H_n, \tag{6}$$

$\delta_{\alpha\beta}^\perp$ — символ Кронекера для поперечных компонент, т.е. для α и β , равных x или y ; тензор $\delta_{\alpha\beta}^{zz}$ равен единице при $\alpha=\beta=z$ и нулю при других α и β ; слагаемые с a_n присутствуют в формуле (5) только при $r_n \neq 0$, а слагаемые с d_n — только при $H_n \neq 0$; величина $\varepsilon_{\alpha\beta}^\perp = -\varepsilon_{\beta\alpha}^\perp$ — единичный антисимметричный тензор поперечных компонент. Последнее слагаемое присутствует в матрице силовых постоянных (5) только для тех звезд n , которые вместе с тройками циклически симметричных векторов $\mathbf{R}_{np} = \mathbf{R}_{ns}$ содержат также и зеркально симметричные им векторы $\mathbf{R}_{np} = (-\mathbf{R}_{ns})$, и первым из этих троек в (5) соответствует значение $I_p = 1$, а вторым — $I_p = -1$. Данное слагаемое (которое не учитывается в упрощенных AS- и MAS-моделях [16]) описывает анизотропию взаимодействий в базовой плоскости ГПУ-кристалла, и оно отлично от нуля только для таких пар атомов, для которых расположение окружающих эту пару атомов решетки не имеет симметрии относительно отражения в плоскости, содержащей векторы \mathbf{R}_{np} и \mathbf{c} , так что наличие

данного слагаемого связано с отсутствием симметрии ГПУ-кристалла относительно отражений. Так, для используемой ниже модели взаимодействий в восьми координационных сферах, слагаемое с e_n в формуле (5) присутствует только для второй, седьмой и восьмой координационных сфер, содержащих тройки векторов, $\mathbf{R}_{2p} = \pm\mathbf{b}_s$, $\mathbf{R}_{7p} = \pm(\mathbf{b}_s \pm \mathbf{h})$ и $\mathbf{R}_{8p} = \pm 2\mathbf{b}_s$, для которых расположение окружающих атомов не симметрично относительно отражения в плоскости, содержащей \mathbf{c} и любой из этих векторов \mathbf{R}_{np} .

Отметим, что простейшая AS-модель, в которой матрица силовых постоянных описывается выражением

$$(A_{np}^{\alpha\beta})_{AS} = (\phi_t^n - \phi_r^n) R_{np}^\alpha R_{np}^\beta / R_{np}^2 - \phi_t^n \delta_{\alpha\beta}, \tag{7}$$

соответствует не только опусканию в формуле (5) последнего члена, но также и наложению на четыре константы a_n, b_n, c_n и d_n при каждом n двух соотношений связи:

$$\begin{aligned}
c_n &= b_n + a_n H_n^2 / r_n^2, \\
d_n &= a_n H_n / r_n, \quad e_n = 0,
\end{aligned} \tag{8}$$

где H_n и r_n те же, что в формуле (6). Заметим также, что если описывать взаимодействия четырех ближайших соседей общей тензорной моделью \mathbf{A}_{np} , а для $n \geq 5$ использовать AS-модель (как это делалось, например, в работе [4]), то параметры a_n, \dots, e_n в формуле (5) выражаются через аналогичные параметры a_n, \dots, ϕ_t^n , использовавшиеся в работе [4], так:

$$\begin{aligned}
a_1 &= \beta_1 - \alpha_1, & b_1 &= -\beta_1, & c_1 &= -\gamma_1, \\
d_1 &= \delta_1, & a_2 &= \alpha_2 - \beta_2, & b_2 &= -\alpha_2, \\
c_2 &= -\gamma_2, & e_2 &= -\epsilon_2, & a_3 &= \beta_3 - \alpha_3, \\
b_3 &= -\beta_3, & c_3 &= -\gamma_3, & d_3 &= -\delta_3, \\
b_4 &= -\alpha_4, & c_4 &= -\gamma_4, \\
a_{n \geq 5} &= (\phi_t^n - \phi_r^n) r_n^2 / R_n^2, & b_{n \geq 5} &= -\phi_t^n.
\end{aligned} \tag{9}$$

Будем обозначать относительное смещение атомов в подрешетках k и l (где k и l равно A или B), соответствующее звезде n , как $\mathbf{R}_{np}^{kl} = (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_l)_{np}$; векторы \mathbf{R}_{np} с $\mathbf{H}_{np} = \pm m\mathbf{h}$, принадлежащие m -й базовой плоскости, обозначаем как $\mathbf{R}_{np}\{m\}$; и будем рассматривать модели взаимодействий с $m \leq 2$, в частности, общую тензорную модель взаимодействий восьми соседей (модель GTF-8). Тогда разности \mathbf{R}_{np}^{AA} и \mathbf{R}_{np}^{BB} выражаются через векторы $\mathbf{R}_{np}\{0\}$ или $\mathbf{R}_{np}\{2\}$ в уравнениях (5), а разности $\mathbf{R}_{np}^{AB} = -\mathbf{R}_{np}^{BA}$ — через векторы $\mathbf{R}_{np}\{1\}$. При этом

векторы решетки $\mathbf{R}_{np}\{m\}$ для восьми ближайших соседей даются такими выражениями:

$$\begin{aligned} \{0\}: \mathbf{R}_0 = 0, \quad \mathbf{R}_{2p} = \pm \mathbf{b}_s, \\ \mathbf{R}_{6p} = \pm 3\mathbf{d}_s, \quad \mathbf{R}_{8p} = \pm 2\mathbf{b}_s, \\ \{1\}: \mathbf{R}_{1p} = -\mathbf{d}_s \pm \mathbf{h}, \quad \mathbf{R}_{3p} = 2\mathbf{d}_s \pm \mathbf{h}, \\ \mathbf{R}_{5p} = \{\mathbf{r}_{5,s}^a \pm \mathbf{h}, \mathbf{r}_{5,s}^b \pm \mathbf{h}\}, \\ \{2\}: \mathbf{R}_{4p} = \pm 2\mathbf{h}, \quad \mathbf{R}_{7p} = \pm \mathbf{b}_s \pm 2\mathbf{h}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\mathbf{r}_{5,s}^a = (\mathbf{b}_{s-1} - \mathbf{d}_s)$ и $\mathbf{r}_{5,s}^b = -(\mathbf{d}_s + \mathbf{b}_{s+1})$. Таким образом, координационные сферы с n , равным 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 и 8, включают, соответственно, 6, 6, 6, 2, 12, 6, 12 и 6 векторов \mathbf{R}_{np} со следующими значениями приведенного квадрата длины $\tilde{R}_n^2 = R_n^2/a^2$:

$$\begin{aligned} \tilde{R}_1^2 = 1 + 2\gamma, \quad \tilde{R}_2^2 = 1, \quad \tilde{R}_3^2 = 2 + 2\gamma, \\ \tilde{R}_4^2 = 8/3 + 16\gamma, \quad \tilde{R}_5^2 = 3 + 2\gamma, \\ \tilde{R}_6^2 = 3, \quad \tilde{R}_7^2 = 11/3 + 16\gamma, \quad \tilde{R}_8^2 = 4. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь введен геометрический параметр $\gamma = c^2/8a^2 - 1/3$, который характеризует масштаб отклонений гексагонального отношения c/a от идеального и обычно мал; так, для титана $\gamma \approx -0.019$, а для кобальта $\gamma \approx -0.005$ [21] (нумерация координационных сфер n в формулах (10) и (11) соответствует случаю $\gamma < 0$, характерному для переходных и редкоземельных металлов; при $\gamma > 0$ эта нумерация изменяется очевидным образом). Для поперечных же компонент \mathbf{r}_n приведенные квадраты длины $\tilde{r}_n^2 = r_n^2/a^2$ равны:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_1^2 = 1/3, \quad \tilde{r}_2^2 = \tilde{r}_7^2 = 1, \quad \tilde{r}_3^2 = 4/3, \quad \tilde{r}_4 = 0, \\ \tilde{r}_5^2 = 7/3, \quad \tilde{r}_6^2 = 3, \quad \tilde{r}_8^2 = 4. \end{aligned} \quad (12)$$

3. ДИНАМИЧЕСКАЯ МАТРИЦА ГПУ-КРИСТАЛЛА В МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВОСЬМИ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Шестирядную динамическую матрицу ГПУ-кристалла \mathbf{D} удобно записывать в виде блоков трехрядных матриц $D_{kl}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, где k и l — индексы подрешеток. В используемой модели взаимодействий в трех плоскостях $\{m\} \leq 2$ эта матрица имеет вид [20]

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_{AA} & \mathbf{D}_{AB} \\ \mathbf{D}_{AB}^* & \mathbf{D}_{AA}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{0\}} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{2\}} & \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{1\}} \\ \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{1\}*} & \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{0\}*} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{2\}*} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Здесь трехрядные матрицы $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{\{m\}}$ определены соотношениями

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k},\alpha\beta}^{\{m\}} &= \sum_{n \in \{m\}} A_{n\mathbf{k}}^{\alpha\beta}\{m\}, \\ A_{n\mathbf{k}}^{\alpha\beta}\{m\} &= \sum_p A_{np}^{\alpha\beta} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{np}\{m\}} \end{aligned} \quad (14)$$

и символ $n \in \{m\}$ означает, что звезда n принадлежит m -й базовой плоскости. Если второе из уравнений (14) просуммировать по продольным компонентам \mathbf{H}_{np} , то матрицы $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}\{m\}$ можно записать в виде блоков поперечных и продольных компонент:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{n\mathbf{k}}\{0\} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_n^\perp & 0 \\ 0 & c_n \sigma_n \end{pmatrix}, \\ \mathbf{A}_{n\mathbf{k}}\{1\} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_n^\perp \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) & -i\mathbf{A}_n^{\perp z} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) \\ -i\mathbf{A}_n^{z\perp} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) & c_n \sigma_n \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{n\mathbf{k}}\{2\} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_n^\perp \cos(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) & -i\mathbf{A}_n^{\perp z} \sin(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) \\ -i\mathbf{A}_n^{z\perp} \sin(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) & c_n \sigma_n \cos(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{h}) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где двухрядные матрицы \mathbf{A}_n^\perp и векторы $\mathbf{A}_n^{\perp z}$ (транспонированные к векторам $\mathbf{A}_n^{z\perp}$) выражаются через экспоненты $e_{np} = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{np})$ и их суммы $\sigma_n = \sum_p e_{np}$ таким образом:

$$\begin{aligned} (A_n^\perp)_{\alpha\beta} &= b_n \delta_{\alpha\beta}^\perp \sigma_n + \\ &+ \sum_p (a_n n_p^\alpha n_p^\beta + e_n \varepsilon_{\alpha\beta}^\perp I_p) e_{np}, \\ (A_n^{\perp z})_\alpha &= d_n \sum_p n_p^\alpha e_{np}. \end{aligned} \quad (16)$$

Подставляя соотношения (5) и (10) в формулы (16), легко выписать явные выражения для матриц \mathbf{A}_n^\perp и векторов $\mathbf{A}_n^{\perp z}$ в формулах (15). Так, для модели GTF-8 матрицы, входящие в $\mathbf{A}_n\{0\}$ и $\mathbf{A}_n\{2\}$ (для краткости называемые ниже «четными»), даются выражениями

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_0^\perp &= \begin{pmatrix} b_0 & 0 \\ 0 & b_0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_4^\perp = \begin{pmatrix} 2b_4 & 0 \\ 0 & 2b_4 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_2^\perp &= \begin{pmatrix} a_2 \left(2c_{b1} + \frac{c_{b2} + c_{b3}}{2} \right) + b_2\sigma_2 & a_2(c_{b3} - c_{b2})\frac{\sqrt{3}}{2} + e_2\tau_2 \\ a_2(c_{b3} - c_{b2})\frac{\sqrt{3}}{2} - e_2\tau_2 & 3a_2\frac{c_{b2} + c_{b3}}{2} + b_2\sigma_2 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_6^\perp &= \begin{pmatrix} 3a_6\frac{c_{6,2} + c_{6,3}}{2} + b_6\sigma_6 & a_6(c_{6,2} - c_{6,3})\frac{\sqrt{3}}{2} \\ a_6(c_{6,2} - c_{6,3})\frac{\sqrt{3}}{2} & a_6 \left(2c_{6,1} + \frac{c_{6,2} + c_{6,3}}{2} \right) + b_6\sigma_6 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_7^\perp &= \begin{pmatrix} a_7(4c_{b1} + c_{b2} + c_{b3}) + b_7\sigma_7 & a_7(c_{b3} - c_{b2})\sqrt{3} + e_7\tau_7 \\ a_7(c_{b3} - c_{b2})\sqrt{3} - e_7\tau_7 & 3a_7(c_{b2} + c_{b3}) + b_7\sigma_7 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_8^\perp &= \begin{pmatrix} a_8 \left(2c_{8,1} + \frac{c_{8,2} + c_{8,3}}{2} \right) + b_8\sigma_8 & a_8(c_{8,3} - c_{8,2})\frac{\sqrt{3}}{2} + e_8\tau_8 \\ a_8(c_{8,3} - c_{8,2})\frac{\sqrt{3}}{2} - e_8\tau_8 & 3a_8\frac{c_{8,2} + c_{8,3}}{2} + b_8\sigma_8 \end{pmatrix}, \\
 \{\mathbf{A}_{0,2,4,6,8}\}^{\perp z} &= 0; \quad \mathbf{A}_7^{\perp z} = -2id_7 \begin{pmatrix} 2s_{b1} - s_{b2} - s_{b3} \\ (s_{b2} - s_{b3})\sqrt{3} \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{17}$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 c_{bs} &= \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s), \quad s_{bs} = \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s), \quad c_{6,s} = \cos(3\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_s), \quad c_{8,s} = \cos(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s), \\
 \{\sigma_{2,6,8}\} &= 2 \sum_s \{c_{bs}, c_{6,s}, c_{8,s}\}, \quad \{\tau_{2,8}\} = -2i \sum_s \{s_{bs}, s_{8,s}\}, \\
 s_{8,s} &= \sin(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s), \quad \sigma_7 = 2\sigma_2, \quad \tau_7 = 2\tau_2.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Аналогично, «нечетные» матрицы \mathbf{A}_n^\perp и векторы $\mathbf{A}_n^{\perp z}$, определяющие матрицу $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}\{1\}$ в формуле (15), для модели GTF-8 даются выражениями

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_1^\perp &= \begin{pmatrix} a_1(e_{d2} + e_{d3})\frac{3}{2} + b_1\sigma_1 & a_1(e_{d2} - e_{d3})\frac{\sqrt{3}}{2} \\ a_1(e_{d2} - e_{d3})\frac{\sqrt{3}}{2} & a_1 \left(2e_{d1} + \frac{e_{d2} + e_{d3}}{2} \right) + b_1\sigma_1 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_3^\perp &= \begin{pmatrix} a_3(e_{3,2} + e_{3,3})\frac{3}{2} + b_3\sigma_3 & a_3(e_{3,2} - e_{3,3})\frac{\sqrt{3}}{2} \\ a_3(e_{3,2} - e_{3,3})\frac{\sqrt{3}}{2} & a_3 \left(2e_{3,1} + \frac{e_{3,2} + e_{3,3}}{2} \right) + b_3\sigma_3 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_1^{\perp z} &= \begin{pmatrix} d_1(e_{d2} - e_{d3})\sqrt{3} \\ d_1(e_{d2} + e_{d3} - 2e_{d1}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_3^{\perp z} = \begin{pmatrix} d_3(e_{3,3} - e_{3,2})\sqrt{3} \\ d_3(2e_{3,1} - e_{3,2} - e_{3,3}) \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_5^\perp &= \begin{pmatrix} a_5(e_{5,1}^+ + 9e_{5,2}^+ + 4e_{5,3}^+)\frac{3}{14} + b_5\sigma_5 & a_5(5e_{5,1}^- + 3e_{5,2}^- - 8e_{5,3}^-)\frac{\sqrt{3}}{14} \\ a_5(5e_{5,1}^- + 3e_{5,2}^- - 8e_{5,3}^-)\frac{\sqrt{3}}{14} & a_5\frac{25e_{5,1}^+ + e_{5,2}^+ + 16e_{5,3}^+}{14} + b_5\sigma_5 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_5^{\perp z} &= \begin{pmatrix} d_5(-e_{5,1}^- + 3e_{5,2}^- - 2e_{5,3}^-)\sqrt{3/7} \\ d_5(-5e_{5,1}^+ + e_{5,2}^+ + 4e_{5,3}^+)\sqrt{1/7} \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{19}$$

где используются обозначения

$$\begin{aligned} e_{ds} &= \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_s), & e_{3,s} &= \exp(-2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_s), \\ e_{5,1}^\pm &= (e_{a1} \pm e_{b1}), & e_{5,2}^\pm &= (e_{a2} \pm e_{b3}), \\ e_{5,3}^\pm &= (e_{a3} \pm e_{b2}), & e_{as} &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{5,s}^a), \\ e_{bs} &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{5,s}^b), & \sigma_1 &= 2 \sum_s e_{ds}, \\ \sigma_3 &= 2 \sum_s e_{3,s}, & \sigma_5 &= 2 \sum_s e_{5,s}^+. \end{aligned} \quad (20)$$

4. ВЫРАЖЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ В ТОЧКАХ СИММЕТРИИ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА ЧЕРЕЗ ПАРАМЕТРЫ БОРНА – КАРМАНА

В точках симметрии зоны Бриллюэна, которыми для ГПУ-кристалла являются точки Γ , A , M , K , L и H , общие выражения (13)–(19) для матриц $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$ сильно упрощаются. В наших обозначениях эти точки N соответствуют следующим волновым векторам $\mathbf{k} = \mathbf{k}_N$:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_\Gamma &= 0, & \mathbf{k}_A &= \pi\mathbf{h}/2h^2, \\ \mathbf{k}_M &= -2\pi\mathbf{d}_1/a^2, & \mathbf{k}_K &= 4\pi\mathbf{b}_1/3a^2, \\ \mathbf{k}_L &= \mathbf{k}_M + \mathbf{k}_A, & \mathbf{k}_H &= \mathbf{k}_K + \mathbf{k}_A. \end{aligned} \quad (21)$$

Для вычислений фазовых множителей $\exp(-i\mathbf{k}_N \mathbf{R}_{np})$ в выражениях (18) и (20) с векторами \mathbf{R}_{np} из формул (10) удобно использовать соотношения (2). Учитывая также выражения (17) и (19) для $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$, находим, что в обсуждаемых точках N матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k}_N) = \mathbf{D}^N$ в формуле (13) принимают вид

$$\mathbf{D}_{AA}^\Gamma = \begin{pmatrix} D_{11}^\Gamma & 0 & 0 \\ 0 & D_{11}^\Gamma & 0 \\ 0 & 0 & D_{33}^\Gamma \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$\mathbf{D}_{AB}^\Gamma = \begin{pmatrix} -D_{11}^\Gamma & 0 & 0 \\ 0 & -D_{11}^\Gamma & 0 \\ 0 & 0 & -D_{33}^\Gamma \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_{AA}^A = \begin{pmatrix} D_{11}^A & 0 & 0 \\ 0 & D_{11}^A & 0 \\ 0 & 0 & D_{33}^A \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_{AB}^A = 0, \quad (23)$$

$$\mathbf{D}_{AA}^M = \begin{pmatrix} D_{11}^M & 0 & 0 \\ 0 & D_{22}^M & 0 \\ 0 & 0 & D_{33}^M \end{pmatrix}, \quad (24)$$

$$\mathbf{D}_{AB}^M = \begin{pmatrix} D_{14}^M & 0 & 0 \\ 0 & D_{25}^M & 0 \\ 0 & 0 & D_{36}^M \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_{AA}^K = \begin{pmatrix} D_{11}^K & D_{12}^K & 0 \\ -D_{12}^K & D_{11}^K & 0 \\ 0 & 0 & D_{33}^K \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$\mathbf{D}_{AB}^K = D_{14}^K \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_{AA}^L = \begin{pmatrix} D_{11}^L & 0 & 0 \\ 0 & D_{22}^L & 0 \\ 0 & 0 & D_{33}^L \end{pmatrix}, \quad (26)$$

$$\mathbf{D}_{AB}^L = D_{26}^L \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_{AA}^H = \begin{pmatrix} D_{11}^H & D_{12}^H & 0 \\ -D_{12}^H & D_{11}^H & 0 \\ 0 & 0 & D_{33}^H \end{pmatrix}, \quad (27)$$

$$\mathbf{D}_{AB}^H = D_{16}^H \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i \\ 1 & -i & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь через D_{pq}^N обозначены ненулевые элементы каждой из матриц, через которые выражены также и другие ненулевые элементы, если они связаны с D_{pq}^N соотношениями симметрии, а значения фазы матричных элементов \mathbf{D}_{AB}^N указаны ниже в уравнениях (48)–(54). Как общая структура матриц \mathbf{D}^N в равенствах (22)–(27), так и упомянутые фазы матричных элементов \mathbf{D}_{AB}^N совпадают с найденными Уорреном [20] на основе теории групп; при сравнении с работой [20] нужно учесть, что наши матрицы $\mathbf{D}_{AB}(\mathbf{k})$ связаны с используемыми Уорреном $\mathbf{D}_{AB}^W(\mathbf{k})$ как

$$\mathbf{D}_{AB}(\mathbf{k}) = \mathbf{D}_{AB}^W(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{BA}),$$

где вектор $\mathbf{R}_{BA} = (\mathbf{d}_3 + \mathbf{h})$ описывает относительное смещение подрешеток B и A .

С помощью уравнений (13) каждый матричный элемент D_{pq}^N можно выразить через параметры a_n, \dots, e_n в матрицах (5). Возникающие уравнения для параметров БК модели ГТФ-8 распадаются на следующие группы.

1) Уравнения для параметров a_n и b_n в матрицах $\mathbf{A}_n\{0\}$ и $\mathbf{A}_n\{2\}$ (для краткости называемых ниже четными):

$$D_{11}^\Gamma = b_0 + 3(a_2 + 2b_2) + 2b_4 + 3(a_6 + 2b_6) + 6(a_7 + 2b_7) + 3(a_8 + 2b_8), \quad (28)$$

$$D_{11}^A = b_0 + 3(a_2 + 2b_2) - 2b_4 + 3(a_6 + 2b_6) - 6(a_7 + 2b_7) + 3(a_8 + 2b_8), \quad (29)$$

$$D_{11}^M = b_0 + (a_2 - 2b_2) + 2b_4 - (3a_6 + 2b_6) + 2(a_7 - 2b_7) + 3(a_8 + 2b_8), \quad (30)$$

$$D_{11}^L = b_0 + (a_2 - 2b_2) - 2b_4 - (3a_6 + 2b_6) - 2(a_7 - 2b_7) + 3(a_8 + 2b_8), \quad (31)$$

$$D_{11}^K = b_0 - \frac{3}{2}(a_2 + 2b_2) + 2b_4 + 3(a_6 + 2b_6) - 3(a_7 + 2b_7) - 3b_8, \quad (32)$$

$$D_{11}^H = b_0 - \frac{3}{2}(a_2 + 2b_2) - 2b_4 + 3(a_6 + 2b_6) + 3(a_7 + 2b_7) - 3b_8, \quad (33)$$

$$D_{22}^M = b_0 - (3a_2 + 2b_2) + 2b_4 + (a_6 - 2b_6) - 2(3a_7 + 2b_7) + 3(a_8 + 2b_8), \quad (34)$$

$$D_{22}^L = b_0 - (3a_2 + 2b_2) - 2b_4 + (a_6 - 2b_6) + 2(3a_7 + 2b_7) + 3(a_8 + 2b_8). \quad (35)$$

Отметим еще соотношения, которые получаются вычитанием, соответственно, уравнения (29) из (28), (31) из (30) и (33) из (32):

$$\begin{aligned} 4b_4 + 12a_7 + 24b_7 &= D_{11}^{\Gamma A}, \\ 4b_4 + 4a_7 - 8b_7 &= D_{11}^{ML}, \\ 4b_4 - 6a_7 - 12b_7 + D_{11}^H &= D_{11}^K, \end{aligned} \quad (36)$$

где для краткости введено обозначение $D_{pq}^{NN'} = D_{pq}^N - D_{pq}^{N'}$. Уравнения (36) позволяют выразить

b_4, a_7 и b_7 через матричные элементы D_{pq}^N . После этого вычитание уравнения (35) из (34) дает соотношение связи между различными элементами D_{pq}^N , которое так же, как и последнее уравнение (36), мы записываем в форме, удобной для приводимых ниже обсуждений этих уравнений:

$$D_{22}^L - \frac{16}{9}D_{11}^H = D_{22}^M + \frac{2}{9}D_{11}^{\Gamma A} + D_{11}^{ML} - \frac{16}{9}D_{11}^K. \quad (37)$$

2) Уравнения для четных параметров c_n :

$$D_{33}^\Gamma = c_0 + 6c_2 + 2c_4 + 6c_6 + 12c_7 + 6c_8, \quad (38)$$

$$D_{33}^A = c_0 + 6c_2 - 2c_4 + 6c_6 - 12c_7 + 6c_8, \quad (39)$$

$$D_{33}^M = c_0 - 2c_2 + 2c_4 - 2c_6 - 4c_7 + 6c_8, \quad (40)$$

$$D_{33}^L = c_0 - 2c_2 - 2c_4 - 2c_6 + 4c_7 + 6c_8, \quad (41)$$

$$D_{33}^K = c_0 - 3c_2 + 2c_4 + 6c_6 - 6c_7 - 3c_8, \quad (42)$$

$$D_{33}^H = c_0 - 3c_2 - 2c_4 + 6c_6 + 6c_7 - 3c_8. \quad (43)$$

Вычитание уравнений (39) из (38) и (41) из (40) дает аналогичные (36) уравнения для c_4 и c_7 , после чего вычитание уравнения (43) из (42) дает уравнение связи между различными матричными элементами D_{33}^N :

$$4c_4 + 24c_7 = D_{33}^{\Gamma A}, \quad 4c_4 - 8c_7 + D_{33}^L = D_{33}^M, \quad (44)$$

$$D_{33}^H - \frac{9}{8}D_{33}^L = D_{33}^K - \frac{D_{33}^{\Gamma A}}{8} - \frac{9}{8}D_{33}^M. \quad (45)$$

3) Уравнения для параметров e_n :

$$D_{12}^K = 3i\sqrt{3}(e_2 + 2e_7 - e_8), \quad (46)$$

$$D_{12}^H = 3i\sqrt{3}(e_2 - 2e_7 - e_8).$$

4) Уравнения для «нечетных» параметров a_n и b_n в матрицах $\mathbf{A}_n\{1\}$:

$$-D_{11}^\Gamma = 3(a_1 + 2b_1) + 3(a_3 + 2b_3) + 6(a_5 + 2b_5), \quad (47)$$

$$D_{14}^M = \left[(3a_1 + 2b_1) - 3(a_3 + 2b_3) + \left(\frac{18a_5}{7} + 4b_5 \right) \right] \exp\left(-\frac{i\pi}{3}\right), \quad (48)$$

$$D_{25}^M = \left[(-a_1 + 2b_1) - 3(a_3 + 2b_3) + \left(\frac{10a_5}{7} + 4b_5 \right) \right] \exp\left(-\frac{i\pi}{3}\right), \quad (49)$$

$$D_{14}^K = -\frac{3}{2}(a_1 + a_3) + \frac{39}{14}a_5. \quad (50)$$

5) Уравнения для нечетных параметров c_n :

$$-D_{33}^\Gamma = 6c_1 + 6c_3 + 12c_5, \quad (51)$$

$$D_{36}^M = (2c_1 - 6c_3 + 4c_5) \exp\left(-\frac{i\pi}{3}\right). \quad (52)$$

6) Уравнения для нечетных параметров d_n :

$$D_{26}^L = 4 \left(d_1 - \frac{4}{\sqrt{7}} d_5 \right) \exp \left(-\frac{5i\pi}{6} \right), \quad (53)$$

$$D_{16}^H = -3 \left(d_1 - d_3 - \frac{d_5}{\sqrt{7}} \right). \quad (54)$$

Приведем теперь выражения для матричных элементов D_{pq}^N в уравнениях (28)–(54) модели GTF-8 через частоты фононов ω_i . Эти частоты связаны с собственными значениями λ_i динамической матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ соотношением

$$\lambda_i = M\omega_i^2, \quad (55)$$

где M — масса атома. Поэтому для установления связи между элементами D_{pq}^N и частотами $\omega_i(N)$ нужно для каждой из рассматриваемых точек N найти собственные значения $\lambda_i(N)$ динамической матрицы (13) (что описано, например в работе [20]), а затем выразить D_{pq}^N через эти $\lambda_i(N)$. Ниже приводятся получающиеся выражения для D_{pq}^N . При этом тип каждого из колебаний $i(N)$ мы указываем как с помощью обозначений теории групп, использовавшихся в работах [20] и [16], так и поясняющими нижними индексами, обозначая поляризацию параллельно или перпендикулярно оси z индексом « \parallel » или « \perp », продольное или поперечное колебание — индексом « L » или « T », а акустическую или оптическую ветвь — индексом « A » или « O ».

1. Точка Γ . Здесь имеются три акустические ветви с $\lambda_A(\Gamma) = 0$, два вырожденных оптических колебания с поляризацией в базовой плоскости и одно оптическое колебание с поляризацией вдоль оси z . Для элементов D_{pq}^Γ в формуле (22) имеем

$$D_{11}^\Gamma = \frac{1}{2} \lambda_{O\perp}(\Gamma_5^+), \quad D_{33}^\Gamma = \frac{1}{2} \lambda_{O\parallel}(\Gamma_3^+). \quad (56)$$

2. Точка A . Здесь имеются четыре вырожденных поперечных и два вырожденных продольных колебания, и элементы D_{pq}^A в формуле (23) выражаются через $\lambda_i(A)$ так:

$$D_{11}^A = \lambda_{T\perp}(A_3), \quad D_{33}^A = \lambda_{L\parallel}(A_1). \quad (57)$$

3. Точка M . Здесь имеются шесть невырожденных частот, и матричные элементы D_{pq}^M в формуле (24) выражаются через них таким образом:

$$\begin{aligned} D_{11}^M &= \frac{1}{2} [\lambda_{TO\perp}(M_3^-) + \lambda_{TA\perp}(M_4^+)], \\ |D_{14}^M| &= \frac{1}{2} [\lambda_{TO\perp}(M_3^-) - \lambda_{TA\perp}(M_4^+)], \\ D_{22}^M &= \frac{1}{2} [\lambda_{LO\perp}(M_2^-) + \lambda_{LA\perp}(M_1^+)], \\ |D_{25}^M| &= \frac{1}{2} [\lambda_{LO\perp}(M_2^-) - \lambda_{LA\perp}(M_1^+)], \\ D_{33}^M &= \frac{1}{2} [\lambda_{TO\parallel}(M_3^+) + \lambda_{TA\parallel}(M_4^-)], \\ |D_{36}^M| &= \frac{1}{2} [\lambda_{TO\parallel}(M_3^+) - \lambda_{TA\parallel}(M_4^-)]. \end{aligned} \quad (58)$$

4. Точка K . Здесь имеются четыре колебания с поляризацией в плоскости (x, y) , из которых два колебания (типа K_5) вырождены и два вырожденных колебания (типа K_6) с поляризацией вдоль оси z . Элементы D_{pq}^K в формуле (25) связаны с $\lambda_i(K)$ так:

$$D_{11}^K = \frac{1}{4} [2\lambda_{\perp}(K_5) + \lambda_{TO\perp}(K_1) + \lambda_{TA\perp}(K_3)], \quad (59)$$

$$D_{12}^K = \frac{1}{2} i \Delta(K),$$

$$|D_{14}^K| = \frac{1}{4} [\lambda_{TO\perp}(K_1) - \lambda_{TA\perp}(K_3)], \quad (60)$$

$$D_{33}^K = \lambda_{TA\parallel}(K_6) = \lambda_{TO\parallel}(K_6),$$

где через $\Delta(K)$ обозначено смещение значения $\lambda(K_5)$ для двукратно вырожденного колебания K_5 относительно полусуммы значений $\lambda(K_1)$ и $\lambda(K_3)$:

$$\Delta(K) = \lambda_{\perp}(K_5) - \frac{1}{2} [\lambda_{TO\perp}(K_1) + \lambda_{TA\perp}(K_3)]. \quad (61)$$

5. Точка L . Здесь имеются три пары вырожденных колебаний, одна из которых имеет симметрию L_2 , а две другие — симметрию L_1 . Следуя работе [4], верхнюю ветвь колебаний L_1 мы называем оптической и обозначаем L_{1O} , а нижнюю — акустической и обозначаем L_{1A} . Четыре ненулевых элемента D_{pq}^L связаны с $\lambda_i(L)$ так:

$$D_{11}^L = \lambda(L_2), \quad (62)$$

$$D_{22}^L + D_{33}^L = \lambda(L_{1A}) + \lambda(L_{1O}), \quad (63)$$

$$|D_{26}^L| = [D_{22}^L D_{33}^L - \lambda(L_{1A}) \lambda(L_{1O})]^{1/2}. \quad (64)$$

6. Точка H . Здесь тоже имеются три пары вырожденных колебаний; одна пара имеет симметрию H_1 , две другие — симметрию H_3 . Верхнюю ветвь колебаний H_3 называем оптической и обозначаем H_{3O} , а нижнюю — акустической и обозначаем H_{3A} . Три собственных значения $\lambda(H_1)$, $\lambda(H_{3O})$ и $\lambda(H_{3A})$ определяются четырьмя матричными элементами D_{pq}^H , D_{12}^H , D_{33}^H и D_{16}^H :

$$\begin{aligned} D_{11}^H + iD_{12}^H &= \lambda(H_1), \\ D_{11}^H - iD_{12}^H + D_{33}^H &= \lambda(H_{3A}) + \lambda(H_{3O}), \end{aligned} \quad (65)$$

$$|D_{16}^H| = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \left[(D_{11}^H - iD_{12}^H) D_{33}^H - \lambda(H_{3A})\lambda(H_{3O}) \right]^{1/2}. \quad (66)$$

Уравнения (37), (45), (63) и (65) образуют систему пяти уравнений для пяти элементов $D_{22}^L, D_{33}^L, D_{11}^H, D_{12}^H$ и D_{33}^H , после определения которых величины $|D_{26}^L|$ и $|D_{16}^H|$ можно находить из соотношений (64) и (66). Однако, эти пять уравнений являются линейно зависимыми, и условие их разрешимости дает следующее уравнение связи между λ_i (т. е. между квадратами частот ω_i^2) в симметричных точках N :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{9} \left[\lambda(\Gamma_5^+) + \frac{\lambda(\Gamma_3^+)}{2} \right] + \\ &+ \frac{8}{9} \left[\lambda(K_5) + \lambda(K_6) + \frac{\lambda(K_1)}{2} + \frac{\lambda(K_3)}{2} \right] + \\ &+ [\lambda(L_{1A}) + \lambda(L_{1O}) + \lambda(L_2)] = \\ &= \frac{1}{9} [2\lambda(A_3) + \lambda(A_1)] + \frac{8}{9} [\lambda(H_{3A}) + \lambda(H_{3O}) + \lambda(H_1)] + \\ &+ \frac{1}{2} [\lambda(M_1^+) + \lambda(M_3^+) + \lambda(M_4^+) + \\ &+ \lambda(M_2^-) + \lambda(M_3^-) + \lambda(M_4^-)]. \end{aligned} \quad (67)$$

Отметим, что соотношения (67), (37) и (45) выведены из уравнений для элементов четных матриц $\mathbf{A}_n\{2k\}$, а взаимодействия девятых соседей с векторами

$$\mathbf{R}_{9p} = (\pm 2\mathbf{b}_s - \mathbf{d}_s \pm \mathbf{h})$$

описываются нечетной матрицей $\mathbf{A}_9\{1\}$. Поэтому три этих соотношения справедливы для всех моделей GTF-9 и нарушаются взаимодействиями только десятых и более далеких соседей.

Таким образом, при выполнении условия совместности (67) из пяти уравнений (37), (45), (63) и (65) независимыми являются только четыре, например, уравнения (45), (63) и (65). Тогда вместе с тремя уравнениями (36) и двумя уравнениями (44) мы имеем систему девяти уравнений для десяти неизвестных: пяти матричных элементов D_{22}^L, D_{33}^L и $D_{11}^H, D_{12}^H, D_{33}^H$, и пяти параметров БК: b_4, c_4, a_7, b_7 и c_7 . Эту систему можно решить, если использовать дополнительные предположения о параметрах БК, например, соотношения AS-модели (8) для некоторых из этих параметров. Это иллюстрируется ниже в разд. 7.

5. ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ЧЕРЕЗ ПАРАМЕТРЫ БОРНА – КАРМАНА

Задача выражения модулей упругости ГПУ-кристалла через параметры Борна–Кармана решалась ранее только для модифицированной аксиально-симметричной модели взаимодействий шести соседей [3]. Ниже эта задача решается для общей тензорной модели со взаимодействием любого числа соседей, и результаты иллюстрируются на примере модели GTF-8.

Связь упругих модулей $c_{\alpha\gamma,\beta\delta}$ с разложением динамической матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ при малых \mathbf{k} устанавливается из условий совпадения уравнений для спектра длинноволновых акустических фононов с уравнениями теории упругости [1]. Поскольку положения атомов в ГПУ-кристалле не центросимметричны, микроскопическое выражение для $c_{\alpha\gamma,\beta\delta}$ включает два вклада разного типа: вклад $c_h^{\alpha\gamma,\beta\delta}$, связанный с однородным смещением всех атомов элементарной ячейки в рассматриваемом акустическом колебании, и вклад $c_r^{\alpha\gamma,\beta\delta}$, связанный с относительными смещениями атомов в этом колебании:

$$c_{\alpha\gamma,\beta\delta} = c_h^{\alpha\gamma,\beta\delta} + c_r^{\alpha\gamma,\beta\delta}. \quad (68)$$

При этом компоненты тензора $c_{\alpha\gamma,\beta\delta}$ в формуле (68) должны удовлетворять условию симметрии относительно перестановки первой и второй пар индексов [1]:

$$c_{\alpha\gamma,\beta\delta} = c_{\beta\delta,\alpha\gamma}. \quad (69)$$

Чтобы получить выражения для тензоров \mathbf{c}_h и \mathbf{c}_r в формуле (68), запишем разложение матриц \mathbf{D}_{AA} и \mathbf{D}_{AB} в формуле (13) при малых \mathbf{k} в следующем виде:

$$\begin{aligned} D_{AA}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \Big|_{k \rightarrow 0} &= \sum_{\gamma\delta} d_{AA}^{\alpha\beta,\gamma\delta} k_\gamma k_\delta, \\ D_{AB}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \Big|_{k \rightarrow 0} &= -i \sum_{\gamma} d_{AB}^{\alpha\beta,\gamma} k_\gamma + \sum_{\gamma\delta} d_{AB}^{\alpha\beta,\gamma\delta} k_\gamma k_\delta \end{aligned} \quad (70)$$

и определим тензор $\mathbf{d}_h = \mathbf{d}$ соотношением

$$d_{\alpha\beta,\gamma\delta} = d_{AA}^{\alpha\beta,\gamma\delta} + d_{AB}^{\alpha\beta,\gamma\delta}. \quad (71)$$

Тогда первое слагаемое в формуле (68) определяется величинами $d_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ в формуле (71) и выражается через них таким образом [1]:

$$c_h^{\alpha\gamma,\beta\delta} = (d_{\alpha\beta,\gamma\delta} + d_{\beta\gamma,\alpha\delta} - d_{\beta\delta,\alpha\gamma}) / \Omega_a, \quad (72)$$

где Ω_a есть объем на один атом в кристалле. Второе слагаемое в формуле (68) определяется величинами $d_{AB}^{\alpha\beta\gamma}$ в формуле (70) и выражается через них так:

$$c_r^{\alpha\gamma,\beta\delta} = - \sum_{\mu} d_{AB}^{\alpha\gamma\mu} \frac{d_{AB}^{\beta\delta\mu}}{2D_{11}^{\Gamma}\Omega_a}, \quad (73)$$

где D_{11}^{Γ} — то же, что в формуле (28). При выводе равенства (73) учтено, что, как видно из приводимых ниже выражений (84)–(87), тензор $d_{AB}^{\alpha\mu\gamma}$ в формуле (70) симметричен по всем трем индексам α , γ и μ , и в нем отличны от нуля только компоненты со значениями α , γ и μ , соответствующими базовой плоскости (x, y) , для которых тензор \mathbf{D}_{AA}^{Γ} в формуле (22) сводится к скаляру D_{11}^{Γ} .

Отметим, что последнее слагаемое формулы (5), пропорциональное e_n , не дает вклада ни в первое, ни во второе слагаемое в формуле (70): соответствующее ему слагаемое в матрице $A_{\mathbf{nk}}^{\alpha\beta}\{m\}$ в формуле (14) пропорционально выражению $\tau_n \propto \sum_s \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ns}$ (это иллюстрируется формулами (18) для τ_2 , τ_7 и τ_8), а разложение этих нечетных по \mathbf{k} выражений при малых \mathbf{k} начинается только с кубических членов, так как линейный член обращается в нуль вследствие равенства $\sum_s \mathbf{r}_{ns} = 0$. Поэтому вклад последних слагаемых в формуле (5) в упругие модули при любом n отсутствует.

Рассмотрим сначала «однородный» вклад \mathbf{d}_h (71). Выполняя в формуле (14) разложение по \mathbf{k} , приходим к следующему общему выражению для тензора $d_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ в формуле (70) через матрицы силовых постоянных (5):

$$d_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \sum_n d_n^{\alpha\beta,\gamma\delta}, \quad (74)$$

$$d_n^{\alpha\beta,\gamma\delta} = - \sum_p R_{np}^{\gamma} R_{np}^{\delta} A_{np}^{\alpha\beta} / 2,$$

где $d_n^{\alpha\beta,\gamma\delta}$ соответствует вкладу в полное $d_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ взаимодействий n -х соседей.

Если записать векторы \mathbf{R}_{np} в формуле (74), как в равенствах (10), в виде суммы поперечной и продольной компонент: $\mathbf{R}_{np} = r_n \mathbf{n}_p + H_n \mathbf{n}_p^z$, то после подстановки этих \mathbf{R}_{np} в формулу (74) и суммирования по двум значениям n_p^z нечетные по n_p^z члены в формуле (74) выпадают, произведения $n_p^z n_{\delta}^z$ дают

тензоры $\delta_{\gamma\delta}^{zz}$, и выражение (74) можно записать как

$$d_n^{\alpha\beta,\gamma\delta} = -\frac{1}{2} \sum_p [(r_n^2 n_p^{\gamma} n_p^{\delta} + H_n^2 \delta_{\gamma\delta}^{zz}) \times \\ \times (a_n n_p^{\alpha} n_p^{\beta} + b_n \delta_{\alpha\beta}^{\perp} + c_n \delta_{\alpha\beta}^{zz}) + \\ + d_n r_n H_n (n_p^{\alpha} n_p^{\gamma} \delta_{\beta\delta}^{zz} + n_p^{\beta} n_p^{\gamma} \delta_{\alpha\delta}^{zz} + \\ + n_p^{\alpha} n_p^{\delta} \delta_{\beta\gamma}^{zz} + n_p^{\beta} n_p^{\delta} \delta_{\alpha\gamma}^{zz})]. \quad (75)$$

Суммирование по p произведений поперечных векторов \mathbf{n}_p в формуле (75) легко выполнить, если учесть следующие соотношения, справедливые для любых трех единичных векторов \mathbf{n}_s в плоскости (x, y) , составляющих углы $\pm 120^\circ$ друг с другом:

$$\sum_s \mathbf{n}_s = 0, \quad \sum_s n_s^{\alpha} n_s^{\beta} = \frac{3}{2} \delta_{\alpha\beta}^{\perp}, \quad (76)$$

$$\sum_s n_s^{\alpha} n_s^{\beta} n_s^{\gamma} n_s^{\delta} = \frac{3}{8} \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\perp},$$

где через $\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\perp}$ обозначен полностью симметричный единичный тензор четвертого ранга в плоскости (x, y) :

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\perp} = \delta_{\alpha\beta}^{\perp} \delta_{\gamma\delta}^{\perp} + \delta_{\alpha\gamma}^{\perp} \delta_{\beta\delta}^{\perp} + \delta_{\alpha\delta}^{\perp} \delta_{\beta\gamma}^{\perp}. \quad (77)$$

Поскольку в каждую звезду n векторы \mathbf{R}_{np} с ненулевыми r_n входят в виде троек, соответствующих поворотам на $\pm 120^\circ$, что иллюстрируется формулами (10), используя равенства (76), выражение (75) можно записать в таком виде:

$$d_n^{\alpha\beta,\gamma\delta} = -\frac{1}{4} z_n \left[\frac{\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\perp} r_n^2 a_n}{4} + \delta_{\alpha\beta}^{\perp} \delta_{\gamma\delta}^{\perp} r_n^2 b_n + \right. \\ + \delta_{\alpha\beta}^{\perp} \delta_{\gamma\delta}^{zz} H_n^2 (a_n + 2b_n) + \delta_{\alpha\beta}^{zz} \delta_{\gamma\delta}^{\perp} r_n^2 c_n + \\ + \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{zzzz} 2H_n^2 c_n + (\delta_{\alpha\gamma}^{\perp} \delta_{\beta\delta}^{zz} + \delta_{\beta\delta}^{\perp} \delta_{\alpha\gamma}^{zz} + \\ \left. + \delta_{\alpha\delta}^{\perp} \delta_{\beta\gamma}^{zz} + \delta_{\beta\delta}^{\perp} \delta_{\alpha\gamma}^{zz}) r_n H_n d_n \right], \quad (78)$$

где z_n — координационное число (т. е. полное число векторов \mathbf{R}_{np}) в звезде n , а величина $\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{zzzz}$ равна 1, если $\alpha = \beta = \gamma = \delta = z$, и нулю в других случаях.

Таким образом, тензор $d_{\alpha\beta,\gamma\delta}/\Omega_a$ в формуле (72) имеет следующую структуру:

$$d_{\alpha\beta,\gamma\delta}/\Omega_a = A \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\perp} + B \delta_{\alpha\beta}^{\perp} \delta_{\gamma\delta}^{\perp} + C \delta_{\alpha\beta}^{\perp} \delta_{\gamma\delta}^{zz} + \\ + D \delta_{\alpha\beta}^{zz} \delta_{\gamma\delta}^{\perp} + E \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{zzzz} + \\ + F (\delta_{\alpha\gamma}^{\perp} \delta_{\beta\delta}^{zz} + \delta_{\beta\delta}^{\perp} \delta_{\alpha\gamma}^{zz} + \delta_{\alpha\delta}^{\perp} \delta_{\beta\gamma}^{zz} + \delta_{\beta\delta}^{\perp} \delta_{\alpha\gamma}^{zz}), \quad (79)$$

где константы A, \dots, F выражаются через параметры БК в формуле (5) таким образом:

$$\begin{aligned} \zeta A &= - \sum_n \frac{z_n r_n^2 a_n}{8}, \quad \zeta B = - \sum_n \frac{z_n r_n^2 b_n}{2}, \\ \zeta C &= - \sum_n z_n H_n^2 \frac{a_n + 2b_n}{2}, \\ \zeta D &= - \sum_n \frac{z_n r_n^2 c_n}{2}, \quad \zeta E = - \sum_n z_n H_n^2 c_n, \\ \zeta F &= - \sum_n \frac{z_n H_n r_n d_n}{2}, \end{aligned} \quad (80)$$

и через ζ в формулах (80) обозначено отношение удвоенного атомного объема Ω_a в ГПУ-кристалле к квадрату постоянной решетки a^2 :

$$\zeta = \frac{2\Omega_a}{a^2} = a\nu\sqrt{3}, \quad \nu = \frac{c}{2a} = \left(\frac{2}{3} + 2\gamma\right)^{1/2}. \quad (81)$$

Для модели GTF-8 уравнения (80) с учетом равенств (12) принимают вид

$$\begin{aligned} \zeta A &= \frac{1}{4} (a_1 + 3a_2 + 4a_3 + 14a_5 + \\ &\quad + 9a_6 + 6a_7 + 12a_8), \\ \zeta B &= - (b_1 + 3b_2 + 4b_3 + 14b_5 + \\ &\quad + 9b_6 + 6b_7 + 12b_8), \\ \zeta C &= -3\nu^2 \left[(a_1 + 2b_1) + (a_3 + 2b_3) + \right. \\ &\quad \left. + 2(a_5 + 2b_5) + \frac{8b_4}{3} + 8(a_7 + 2b_7) \right], \\ \zeta D &= - (c_1 + 3c_2 + 4c_3 + 14c_5 + \\ &\quad + 9c_6 + 6c_7 + 12c_8), \\ \zeta E &= -6\nu^2 \left(c_1 + c_3 + 2c_5 + \frac{4}{3}c_4 + 8c_7 \right), \\ \zeta F &= -\nu\sqrt{3} (d_1 + 2d_3 + 2d_5\sqrt{7} + 6d_7\sqrt{3}). \end{aligned} \quad (82)$$

Подставляя соотношение (79) для тензора $d_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ в уравнения Борна–Хуанга (72), находим, что вклад $c_h^{\alpha\gamma,\beta\delta}$ в формулу (68) выражается через параметры A, B, \dots, F в выражениях (82) таким образом:

$$\begin{aligned} c_h^{\alpha\gamma,\beta\delta} &= A \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^\perp + B (\delta_{\alpha\beta}^\perp \delta_{\gamma\delta}^\perp + \delta_{\beta\gamma}^\perp \delta_{\alpha\delta}^\perp - \delta_{\beta\delta}^\perp \delta_{\alpha\gamma}^\perp) + \\ &\quad + C (\delta_{\alpha\beta}^\perp \delta_{\gamma\delta}^{zz} + \delta_{\beta\gamma}^\perp \delta_{\alpha\delta}^{zz} - \delta_{\beta\delta}^\perp \delta_{\alpha\gamma}^{zz}) + \\ &\quad + D (\delta_{\alpha\beta}^{zz} \delta_{\gamma\delta}^\perp + \delta_{\beta\gamma}^{zz} \delta_{\alpha\delta}^\perp - \delta_{\beta\delta}^{zz} \delta_{\alpha\gamma}^\perp) + \\ &\quad + E \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{zzzz} + 2F (\delta_{\alpha\gamma}^\perp \delta_{\beta\delta}^{zz} + \delta_{\beta\delta}^\perp \delta_{\alpha\gamma}^{zz}). \end{aligned} \quad (83)$$

Рассмотрим теперь вклад в формулу (68) относительных смещений $c_r^{\alpha\gamma,\beta\delta}$. Согласно соотношениям (73) и (70), этот вклад определяется коэффициента-

ми $d_{AB}^{\alpha\beta\gamma}$ в разложении по \mathbf{k} нечетных матриц силовых постоянных (5):

$$d_{AB}^{\alpha\beta\gamma} = \sum_{n \in \{2k+1\}} d_n^{\alpha\beta\gamma}, \quad d_n^{\alpha\beta\gamma} = \sum_p A_{np}^{\alpha\beta} R_{np}^\gamma. \quad (84)$$

Если во второе равенство (84) подставить выражения (5) для $A_{np}^{\alpha\beta}$ и $R_{np}^\gamma = (r_n n_p^\gamma + H_n n_p^{z\gamma})$ для компонент вектора \mathbf{R}_{np} , то тензор $d_n^{\alpha\beta\gamma}$ примет вид

$$\begin{aligned} d_n^{\alpha\beta\gamma} &= \sum_p (a_n n_p^\alpha n_p^\beta + b_n \delta_{\alpha\beta}^\perp + c_n \delta_{\alpha\beta}^{zz} + \\ &\quad + d_n n_p^\alpha n_p^{z\beta} + d_n n_p^{z\alpha} n_p^\beta) (r_n n_p^\gamma + H_n n_p^{z\gamma}). \end{aligned} \quad (85)$$

После суммирования по всем векторам \mathbf{R}_{np} при данном n ненулевой вклад в сумму (85) вносят только произведения первых членов в первой и второй скобках, а остальные члены дают нуль либо после суммирования по $n_p^{z\gamma} = \pm 1$, либо после суммирования по s вследствие первого равенства (76). Поэтому выражение (85) принимает вид

$$d_n^{\alpha\beta\gamma} = 2a_n r_n \sigma_n^{\alpha\beta\gamma}, \quad (86)$$

где $\sigma_n^{\alpha\beta\gamma}$ означает сумму произведений $n_p^\alpha n_p^\beta n_p^\gamma$, соответствующих всем поперечным векторам \mathbf{r}_{np} в звезде n . С учетом значений этих векторов, приведенных в формуле (10), величины $\sigma_n^{\alpha\beta\gamma}$ для модели GTF-8 даются такими выражениями:

$$\begin{aligned} \sigma_1^{\alpha\beta\gamma} &= \sum_{s=1}^3 \frac{d_s^\alpha d_s^\beta d_s^\gamma}{d^3}, \quad \sigma_3^{\alpha\beta\gamma} = -\sigma_1^{\alpha\beta\gamma}, \\ \sigma_5^{\alpha\beta\gamma} &= \sum_{s=1}^3 \frac{r_{as}^\alpha r_{as}^\beta r_{as}^\gamma + r_{bs}^\alpha r_{bs}^\beta r_{bs}^\gamma}{r_5^3}, \end{aligned} \quad (87)$$

где векторы $\mathbf{r}_{5,s}^a$ и $\mathbf{r}_{5,s}^b$ в формуле (10) обозначены для краткости как \mathbf{r}_{as} и \mathbf{r}_{bs} .

После подстановки выражений (86) и (87) в формулы (84) и (73) вклад относительных смещений $c_r^{\alpha\gamma,\beta\delta}$ в формулу (68) принимает вид

$$\begin{aligned} c_r^{\alpha\gamma,\beta\delta} &= -\frac{2}{D_{11}^\Gamma \Omega_a} \sum_{m,n \in \{2k+1\}} a_m r_m a_n r_n \times \\ &\quad \times \sum_\mu \sigma_m^{\alpha\beta\mu} \sigma_n^{\gamma\delta\mu}. \end{aligned} \quad (88)$$

Свертка по μ тензоров σ_m и σ_n в (88) должна иметь такую структуру:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_\mu (\sigma_m^{\alpha\beta\mu} \sigma_n^{\gamma\delta\mu} + \sigma_n^{\alpha\beta\mu} \sigma_m^{\gamma\delta\mu}) &= \\ = A_{mn} (\delta_{\alpha\beta}^\perp \delta_{\gamma\delta}^\perp + \delta_{\beta\gamma}^\perp \delta_{\alpha\delta}^\perp - \delta_{\beta\delta}^\perp \delta_{\alpha\gamma}^\perp), \end{aligned} \quad (89)$$

где A_{mn} — некоторая константа. Действительно, свертка левой части (89) по α и β или γ и δ должна обращаться в нуль вследствие определений (87) и первого равенства (76), а правая часть равенства (89) является единственным выражением, совместимым и с этим условием, и с симметрией левой части в плоскости (x, y) . Константу A_{mn} можно найти, свертывая (89) по α и γ , а также β и δ . Это дает

$$A_{mn} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\mu} \sigma_m^{\alpha\beta\mu} \sigma_n^{\alpha\beta\mu} = \frac{1}{4} \sum_{p,q} (\mathbf{n}_{pm} \mathbf{n}_{qn})^3. \quad (90)$$

Скалярные произведения $(\mathbf{n}_{pm} \cdot \mathbf{n}_{qn})$ в формуле (90) легко вычислить, используя равенства (2). Так, для модели ГТФ-8 после подстановки получающихся чисел в соотношения (89) и (88) для вклада $c_r^{\alpha\gamma, \beta\delta}$ в (68) получаем

$$c_r^{\alpha\gamma, \beta\delta} = -\frac{3}{4\zeta D_{11}^\Gamma} \left(a_1 - 2a_3 + \frac{20}{7}a_5 \right)^2 \times \\ \times (\delta_{\alpha\beta}^\perp \delta_{\gamma\delta}^\perp + \delta_{\beta\gamma}^\perp \delta_{\alpha\delta}^\perp - \delta_{\beta\delta}^\perp \delta_{\alpha\gamma}^\perp). \quad (91)$$

Сравнивая выражения (91) и (83), видим, что учет вклада относительных смещений $c_r^{\alpha\gamma, \beta\delta}$ в (68) формально сводится к замене константы B во вкладе однородных смещений (83) на перенормированную величину \tilde{B} , равную

$$\tilde{B} = B - \frac{3}{4D_{11}^\Gamma} \left(a_1 - 2a_3 + \frac{20}{7}a_5 \right)^2. \quad (92)$$

Поэтому полное выражение для модулей упругости $c_{\alpha\gamma, \beta\delta}$ дается выражением (83) с константами A, C, D, E и F , приведенными в (82), и заменой константы B на \tilde{B} по соотношению (92). При этом условие симметрии модулей упругости (69) означает, что параметры C и D в (83) должны быть равны. Это дает следующее соотношение между параметрами БК в (82):

$$3\nu^2 \left[(a_1 + 2b_1) + (a_3 + 2b_3) + 2(a_5 + 2b_5) + \right. \\ \left. + \frac{8}{3}b_4 + 8(a_7 + 2b_7) \right] = \\ = (c_1 + 3c_2 + 4c_3 + 14c_5 + 9c_6 + 6c_7 + 12c_8). \quad (93)$$

Полагая индексы α, β, γ и δ в уравнении (83) равными x, y или z , можно выразить модули упругости C_{ik} через константы $A, \tilde{B}, C, \dots, F$ в формулах (83) и (92):

$$C_{11} = 3A + \tilde{B}, \quad C_{12} = A - \tilde{B}, \\ C_{33} = E, \quad C_{13} = 2F - C, \quad C_{44} = C, \quad (94)$$

а также получить соотношение $C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$, известное для гексагональных кристаллов [19]. Используя также уравнения (82) и (92) для констант A, \dots, F , получаем пять соотношений связи модулей C_{ik} с параметрами Борна–Кармана:

$$(C_{11} + C_{12}) \zeta = -(a_1 + 3a_2 + 4a_3 + \\ + 14a_5 + 9a_6 + 6a_7 + 12a_8), \quad (95)$$

$$\frac{1}{4}(C_{11} - 3C_{12})\zeta = \\ = -(b_1 + 3b_2 + 4b_3 + 14b_5 + 9b_6 + 6b_7 + 12b_8) - \\ - \frac{3}{4D_{11}^\Gamma} \left(a_1 - 2a_3 + \frac{20}{7}a_5 \right)^2, \quad (96)$$

$$\frac{C_{44}2a^2}{c\sqrt{3}} = -[(a_1 + 2b_1) + (a_3 + 2b_3) + 2(a_5 + 2b_5) + \\ + \frac{8}{3}b_4 + 8(a_7 + 2b_7)], \quad (97)$$

$$C_{33} a^2 / c\sqrt{3} = - \left(c_1 + c_3 + 2c_5 + \frac{4}{3}c_4 + 8c_7 \right), \quad (98)$$

$$\frac{1}{2}(C_{31} + C_{44})a = \\ = - \left(d_1 + 2d_3 + 2d_5\sqrt{7} + 6d_7\sqrt{3} \right), \quad (99)$$

причем в уравнениях (97)–(99) учтены соотношения (81). С учетом равенства (97) уравнение (93) можно также переписать в виде, аналогичном другим уравнениям (95)–(99):

$$\zeta C_{44} = -(c_1 + 3c_2 + 4c_3 + 14c_5 + \\ + 9c_6 + 6c_7 + 12c_8). \quad (100)$$

6. СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ МОДУЛЯМИ УПРУГОСТИ И ЧАСТОТАМИ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В ТОЧКАХ А И Г

Выражения для модулей упругости (95)–(100) вместе с уравнениями для фононных частот $\omega_i(N)$, (28)–(54), образуют систему уравнений для определения параметров БК a_n, \dots, e_n . Однако уравнения (28), (29), (47) и (97) так же, как уравнения (38), (39), (51) и (98), являются линейно зависимыми. Возникающие вследствие этого условия совместности дают два важных общих соотношения между модулями упругости и частотами оптических фононов.

Для вывода этих соотношений заметим, во-первых, что параметры b_4 и c_4 , входящие в уравнения (97) и (98), можно просто выразить через эле-

менты D_{pq}^Γ и D_{pq}^A , если вычтуть уравнение (29) из (28), а уравнение (39) — из (38):

$$\begin{aligned} b_4 + 3(a_7 + 2b_7) &= \frac{D_{11}^\Gamma - D_{11}^A}{4}, \\ c_4 + 6c_7 &= \frac{D_{33}^\Gamma - D_{33}^A}{4}. \end{aligned} \quad (101)$$

В то же время суммы «нечетных» параметров в уравнениях (97) и (98) с точностью до общего множителя совпадают с аналогичными суммами в уравнениях (47) и (51). Вместе с равенствами (101) это позволяет явно выразить правые части уравнений (97) и (98) через элементы D_{pq}^Γ и D_{pq}^A :

$$\begin{aligned} \zeta C_{44} &= \nu^2 (2D_{11}^A - D_{11}^\Gamma), \\ \zeta C_{33} &= \nu^2 (2D_{33}^A - D_{33}^\Gamma). \end{aligned} \quad (102)$$

Используя также равенства (55)–(57) и (81), приходим к следующим соотношениям связи модулей упругости и частот оптических фононов в точках A и Γ :

$$\begin{aligned} C_{44} &= M \left[\omega_\perp^2(A_3) - \frac{\omega_\perp^2(\Gamma_5^+)}{4} \right] \frac{c}{a^2\sqrt{3}}, \\ C_{33} &= M \left[\omega_\parallel^2(A_1) - \frac{\omega_\parallel^2(\Gamma_3^+)}{4} \right] \frac{c}{a^2\sqrt{3}}. \end{aligned} \quad (103)$$

Можно показать, что равенства (103) нарушаются лишь для взаимодействий с третьей и более далекими базисными плоскостями, что для большинства ГПУ-металлов (т. е. при $c/a > 1.581$) соответствует взаимодействиям только двенадцатых и более далеких соседей. Сравнение соотношений (103) с имеющимися экспериментальными данными и возможности использования этих соотношений для оценок протяженности межатомных взаимодействий в ГПУ-металлах подробно обсуждаются в другой работе [22].

7. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ БОРНА – КАРМАНА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Обсудим методы решения уравнений (28)–(54) и (95)–(100) для параметров БК. Предположим сначала, что частоты ω_i измерены или оценены для всех симметричных точек N , как это имеет место для Tb, Sc, Ho, Mg и Ru [4–8, 17]. Тогда полное число независимых уравнений (28)–(54) и (95)–(100), с

учетом обсуждавшихся условий совместности, является на три меньше полного числа параметров БК модели GTF-7, на семь меньше числа параметров модели GTF-8 и на два больше числа параметров модели GTF-6. Поэтому наиболее естественно здесь использовать модель GTF-7, которую нужно дополнить тремя дополнительными условиями. Мы будем накладывать эти условия только в самых дальних из учитываемых координационных сфер, при $n = 6$ и $n = 7$, и будем использовать три формы таких условий: (a) соотношения AS-модели (8) для параметров c_6 , d_7 и e_7 при $c_7 \neq (b_7 + 4\nu^2 a_7)$; (b) соотношения (8) для c_6 , c_7 и d_7 при $e_7 \neq 0$; и (c) предположение о малости b_6 и соотношение (8) для c_7 и d_7 при $e_7 \neq 0$. Для краткости модель GTF-7 с дополнительным условием (a), (b) или (c) будет называться моделью 7a, 7b или 7c:

$$7a: \quad b_6 = c_6, \quad d_7 = 2\nu a_7, \quad e_7 = 0, \quad (104)$$

$$7b: \quad b_6 = c_6, \quad c_7 = b_7 + 4\nu^2 a_7, \quad d_7 = 2\nu a_7, \quad (105)$$

$$7c: \quad b_6 = 0, \quad c_7 = b_7 + 4\nu^2 a_7, \quad d_7 = 2\nu a_7. \quad (106)$$

Ниже показано, что получающиеся динамические матрицы оказываются мало чувствительными к выбору формы дополнительных условий (104)–(106).

Для всех моделей GTF-7 сложение уравнений (28) с (29), (30) с (31), (32) с (33) и (34) с (35) дает систему четырех уравнений для пяти величин b_{2n} и a_{2n} :

$$\begin{aligned} b_0 + 3a_2 + 6b_2 + 3a_6 + 6b_6 &= \frac{1}{2}(D_{11}^\Gamma + D_{11}^A), \\ b_0 + a_2 - 2b_2 - 3a_6 - 2b_6 &= \frac{1}{2}(D_{11}^M + D_{11}^L), \\ b_0 - \frac{3}{2}a_2 - 3b_2 + 3a_6 + 6b_6 &= \frac{1}{2}(D_{11}^K + D_{11}^H), \\ b_0 - 3a_2 - 2b_2 + a_6 - 2b_6 &= \frac{1}{2}(D_{22}^M + D_{22}^L). \end{aligned} \quad (107)$$

Аналогично, сложение уравнений (38) с (39), (40) с (41) и (42) с (43) дает систему трех уравнений для трех величин c_{2n} :

$$\begin{aligned} c_0 + 6c_2 + 6c_6 &= \frac{1}{2}(D_{33}^\Gamma + D_{33}^A), \\ c_0 - 2c_2 - 2c_6 &= \frac{1}{2}(D_{33}^M + D_{33}^L), \\ c_0 - 3c_2 + 6c_6 &= \frac{1}{2}(D_{33}^K + D_{33}^H). \end{aligned} \quad (108)$$

Таким образом, при известных матричных элементах D_{pq}^N уравнения (108) позволяют найти все четные параметры c_0 , c_2 и c_6 . После этого параметр b_6 в (107) определяется первым уравнением в соотношении (104), (105) или (106), а остальные четные

параметры b_0, a_2, b_2 и a_6 находятся из уравнений (107).

Обсудим теперь полное решение уравнений для параметров БК в модели 7а. При наличии соотношений (67) и (104) уравнения (36), (44), (45), (63) и (65) образуют систему девяти уравнений для пяти элементов $D_{22,33}^L$ и $D_{11,12,33}^H$ и четырех параметров b_4, c_4, a_7 и b_7 , позволяющую найти все эти величины. Остальные матричные элементы $(D_{AA}^N)_{pq}$ выражаются через частоты $\omega_i(N)$ по формулам (56)–(62). После этого все четные параметры a_n, b_n и c_n вычисляются из уравнений (107) и (108), как описано выше; параметры e_2 и e_7 находятся из уравнений (46) с $e_8 = 0$; и d_7 определяется из последнего уравнения (104).

Уравнения для шести нечетных параметров a_n и b_n с n , равным 1, 3 или 5, решаются с использованием четырех уравнений (47)–(50) и двух уравнений для модулей упругости, (95) и (96). При этом вместо b_n удобно ввести три переменные $x_n = (a_n + 2b_n)$, после чего уравнения (48) и (49) принимают вид

$$x_1 - 3x_3 + 2x_5 + 2a_1 + \frac{4}{7}a_5 = \pm |D_{14}^M|, \quad (109)$$

$$x_1 - 3x_3 + 2x_5 - 2a_1 - \frac{4}{7}a_5 = \pm |D_{25}^M|, \quad (110)$$

где значения $|D_{14}^M|$ и $|D_{25}^M|$ определяются равенствами (58). Наличие двух возможных знаков в правой части уравнений (109) и (110), т.е. четырех вариантов этой системы уравнений, связано с тем, что соотношения для фоновых частот (58) определяют только модуль D_{14}^M или D_{25}^M , но не знак коэффициента при $\exp(-i\pi/3)$ в уравнениях (48) и (49). Поэтому при определении параметров БК из значений $\omega_i(N)$ возникает несколько вариантов решений, и оптимальные варианты нужно выбирать из соображений наилучшего описания наблюдаемых ω_i также и при «несимметричных» волновых векторах $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_N$.

Система уравнений для трех нечетных параметров c_1, c_3 и c_5 получается из соотношений (51), (52) и (100):

$$c_1 + c_3 + 2c_5 = -\frac{D_{33}^\Gamma}{6}, \quad (111)$$

$$-c_1 + 3c_3 - 2c_5 = \pm \frac{|D_{36}^M|}{2}, \quad (112)$$

$$c_1 + 4c_3 + 14c_5 = \nu^2(D_{11}^\Gamma - 2D_{11}^A) - 3c_2 - 9c_6, \quad (113)$$

где величина ζ_{c44} в третьем уравнении выражена через элементы D_{11}^Γ и D_{11}^A по уравнению (102).

Полуразность уравнений (109) и (110) вместе с соотношениями (50) и (95) дает простую систему уравнений для нахождения a_n :

$$a_1 + \frac{2}{7}a_5 = \frac{1}{4}(\pm |D_{14}^M| \mp |D_{25}^M|), \quad (114)$$

$$-a_1 - a_3 + \frac{13}{7}a_5 = \pm \frac{2}{3}|D_{14}^K|, \quad (115)$$

$$a_1 + 4a_3 + 14a_5 = -\zeta(C_{11} + C_{12}) - 3a_2 - 9a_6, \quad (116)$$

где величина $|D_{14}^K|$ определяется первым равенством (60).

Система трех уравнений для трех переменных x_n получится, если мы сложим уравнение (95) с удвоенным уравнением (96), возьмем полусумму уравнений (109) и (110) и перепишем уравнение (47) в переменных x_n . Это дает

$$x_1 + 4x_3 + 14x_5 = -\zeta(C_{11} + C_{66}) - 3x_2 - 9x_6 - \frac{3}{2D_{11}^\Gamma} \left(a_1 - 2a_3 + \frac{20}{7}a_5 \right)^2, \quad (117)$$

$$x_1 - 3x_3 + 2x_5 = \frac{1}{2}(\pm |D_{14}^M| \pm |D_{25}^M|),$$

$$x_1 + x_3 + 2x_5 = -\frac{D_{11}^\Gamma}{3},$$

где величины a_1, a_3 и a_5 в правой части известны из решения системы (114)–(116).

Наконец, уравнения для d_1, d_3 и d_5 следуют из равенств (53), (54) и (99):

$$d_1 - 4d_5/\sqrt{7} = \pm \frac{|D_{26}^L|}{4}, \quad (118)$$

$$d_1 - d_3 - d_5/\sqrt{7} = \pm \frac{|D_{16}^H|}{3}, \quad (119)$$

$$d_1 + 2d_3 + 2d_5\sqrt{7} = -(C_{31} + C_{44})\frac{a}{2}. \quad (120)$$

В соответствии с замечанием после формулы (110), уравнения (109)–(120) дают $2^6 = 64$ варианта решений для a_n, b_n, c_n и d_n с $n = 1, 3, 5$. Мы будем обозначать каждый из этих вариантов символом $\mathbf{S} = (s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6)$, где s_1, s_2, s_3, s_4, s_5 или s_6 означает плюс или минус в правой части, соответственно, уравнения (109), (110), (112), (115), (118) или (119). Наиболее адекватные варианты \mathbf{S} следует выбирать из сравнения с опытом вычисленных частот $\omega_i(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_N$, например, вдоль направлений ГМКГАНЛ. Число вариантов \mathbf{S} , дающих хорошее описание полных спектров $\omega_i(\mathbf{k})$, обычно не слишком велико. В частности, для Tb, Sc, Ti и Co будут использоваться четыре таких

варианта, которые мы будем обозначать греческими буквами α , β , γ или δ :

$$\begin{aligned} \alpha &: (+, +, +, -, +, -), \\ \beta &: (+, +, +, +, +, -), \\ \gamma &: (-, -, +, +, +, -), \\ \delta &: (-, +, +, +, +, -). \end{aligned} \quad (121)$$

Метод определения параметров БК для модели 7b отличается от модели 7a только тем, что в системе уравнений (46) теперь равно нулю не только e_8 , но и e_7 . Тогда элемент D_{12}^H равен элементу D_{12}^K , определенному вторым уравнением (59). При этом девять уравнений (36), (44), (45), (63) и (65) определяют четыре элемента $D_{22,33}^L$ и $D_{11,33}^H$ и пять параметров БК b_4 , c_4 , a_7 , b_7 и c_7 . Остальные параметры БК находятся так же, как в модели 7a. Наконец, модель 7c отличается от 7a только тем, что параметр b_6 в уравнениях (107) определяется условием $b_6 = 0$ вместо $b_6 = c_6$; остальные расчеты остаются теми же, что для модели 7a.

С учетом нескольких возможностей выбора как дополнительного условия (104)–(106), так и набора знаков в уравнениях (121), различные варианты модели GTF-7 будут обозначаться указанием около цифры «7» соответствующей латинской и греческой букв, например: 7a α , 7b γ и т. п.

Описанные модели и методы позволяют определять параметры БК, если частоты ω_i известны во всех симметричных точках зоны Бриллюэна. Однако в большинстве выполнявшихся до сих пор экспериментов [14–16] частоты ω_i измерялись только вдоль направлений ГКМГА, так что данных о $\omega_i(L)$ и $\omega_i(H)$ нет. Тогда значения $\lambda_i(L)$, $\lambda_i(H)$ в правой части уравнений (62)–(66) неизвестны, число независимых уравнений (28)–(54) и (95)–(100) становится на восемь меньше, чем число параметров БК в модели GTF-7, и на три меньше, чем в модели GTF-6, и динамическую матрицу естественно описывать моделью GTF-6 с дополнительными условиями, как это обычно и делалось ранее [14–16]. При этом в уравнениях (28)–(46) величины a_n , b_n , c_n и e_n равны нулю не только при $n = 8$, но и при $n = 7$. Это дает ряд соотношений связи между частотами $\omega_i(N)$, обсуждаемых ниже. Однако уравнения (107)–(117) не меняются и могут решаться так же, как описано выше. В частности, для определения величины b_6 в уравнениях (107) нужно одно дополнительное условие, в качестве которого мы будем использовать соотношение AS-модели: $b_6 = c_6$. В то же время правые части уравнений (118) и (119) в отсутствие из-

мерений для точек L и H не известны. Поэтому для нахождения трех параметров d_1 , d_3 и d_5 есть только одно уравнение (120), и нужны еще два условия. В качестве одного из них будем использовать соотношение AS-модели (8) для параметра d_5 ; параметр d_3 в соответствии с оценками d_n в работах [4, 5] и ниже будем предполагать малым, а модель GTF-6 с такими дополнительными условиями будем называть моделью 6a. Кроме того, для оценки вклада взаимодействий седьмых соседей в моделях GTF-7 рассмотрим также модели 6a', в которых все параметры БК при $n \leq 6$ — те же, что в модели GTF-7a, но взаимодействия седьмых соседей отсутствуют:

$$\begin{aligned} (6a) &: b_6 = c_6, \quad d_3 = 0, \quad d_5 = a_5 \nu \left(\frac{7}{3}\right)^{1/2}, \\ (6a') &: \mathbf{A}_{n \leq 6}^{(6a')} = \mathbf{A}_{n \leq 6}^{(7a)}, \quad \mathbf{A}_7^{(6a')} = 0. \end{aligned} \quad (122)$$

При этом в уравнениях (109), (110), (112) и (115) имеется $2^4 = 16$ возможных наборов знаков $\mathbf{S} = (s_1, s_2, s_3, s_4)$. Для простоты эти наборы будут обозначаться теми же греческими буквами, которые в уравнениях (121) использовались для наборов $\mathbf{S} = (s_1, s_2, s_3, s_4, +, -)$, а модель GTF-6 с одним из дополнительных условий (122) для каждого из этих наборов будем обозначать так же, как выше для моделей GTF-7, например: 6a δ , 6a' α и т. д.

Обсудим теперь уравнения связи между частотами фононов в точках L и H и другими $\omega_i(N)$, которые возникают в модели GTF-6 в дополнение к уравнению (67), справедливому для всех моделей GTF-9. Эти дополнительные уравнения следуют из соотношений (36), (44)–(46), (62) и (65), если положить в них $a_7 = b_7 = c_7 = e_7 = e_8 = 0$, что дает три условия связи между частотами $\omega_i(N)$:

$$\begin{aligned} \omega^2(A_3) - \frac{\omega^2(\Gamma_5^+)}{2} &= \omega^2(L_2) - \\ &- \frac{1}{2} [\omega^2(M_3^-) + \omega^2(M_4^+)] = \\ &= \omega^2(H_1) - \frac{1}{2} [\omega^2(K_1) + \omega^2(K_3)], \\ \omega^2(A_1) - \frac{\omega^2(\Gamma_3^+)}{2} &= \\ &= \omega^2(H_{3A}) + \omega^2(H_{3O}) - \omega^2(H_1) + \\ &+ \frac{1}{2} [\omega^2(K_1) + \omega^2(K_3)] - [\omega^2(K_5) + \omega^2(K_6)]. \end{aligned} \quad (123)$$

В отсутствие измерений частот ω_i в точках L и H , соотношения (123) можно использовать для оценок этих частот через остальные $\omega_i(N)$, а если частоты измерены во всех точках симметрии зоны Бриллюэна, то степень выполнения соотношений (123) позволяет оценить применимость модели GTF-6 к данному металлу.

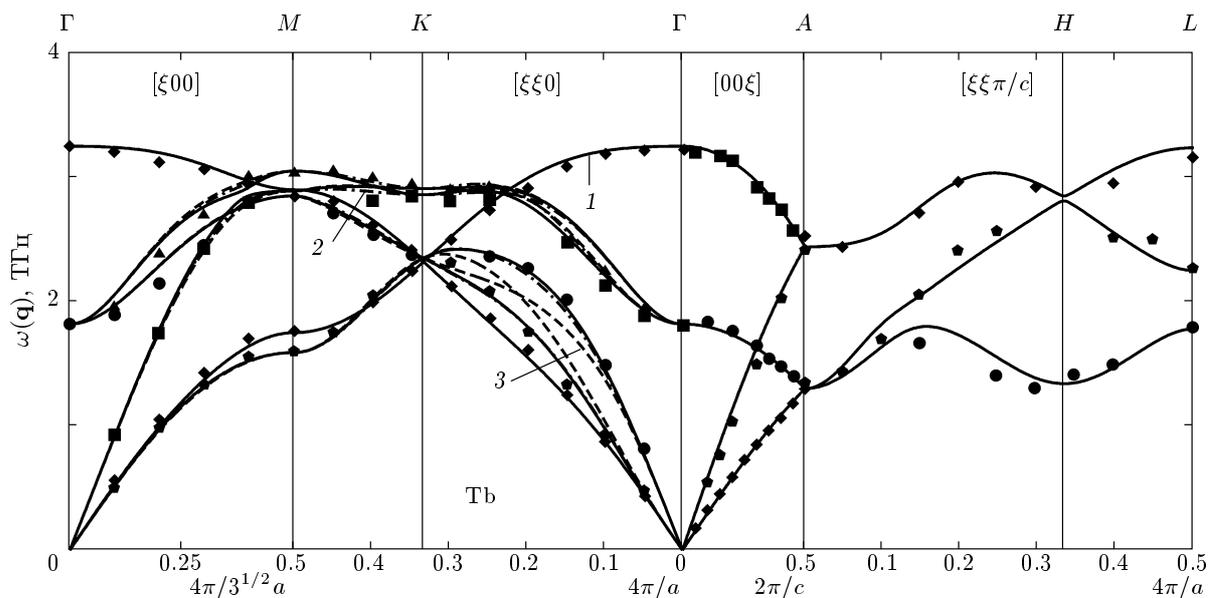


Рис. 1. Фононный спектр Tb. Символы — экспериментальные значения из работы [4]. Кривые вычислены для следующих моделей, описанных в тексте: кривая 1 — модель $7a\alpha$, кривая 2 — $7a\beta$, кривая 3 — $7a\gamma$

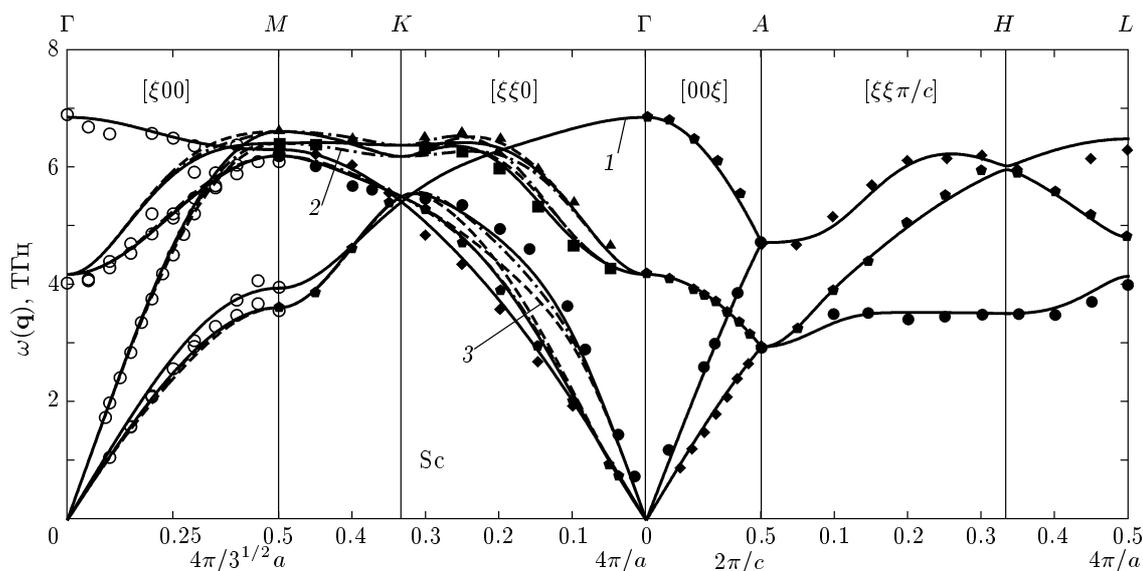


Рис. 2. Фононный спектр Sc. Светлые или темные символы соответствуют экспериментам [6] или [8], остальные обозначения — те же, что на рис. 1

8. ПОСТРОЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ ДЛЯ ТЕРБИЯ, СКАНДИЯ, ТИТАНА И КОБАЛЬТА

В этом разделе мы иллюстрируем описанные методы построением динамических матриц для Tb, Sc, Ti и Co. Tb и Sc выбраны потому, что для них имеются весьма полные данные о фононных спектрах вдоль как направлений ГКМГА, так и АНЛ. Со и Ti

рассматриваются в связи с проблемой расчета взаимодействий атомов внедрения в этих металлах, подробно обсуждаемой в другой работе [13]. Для Tb, Sc и Ti ранее были предложены некоторые модели БК, полученные традиционным методом подгонки расчетных частот ω_i к их наблюдаемым значениям [4, 8, 15]. Сравнение с этими моделями будет иллюстрировать соотношение между предлагаемым ана-

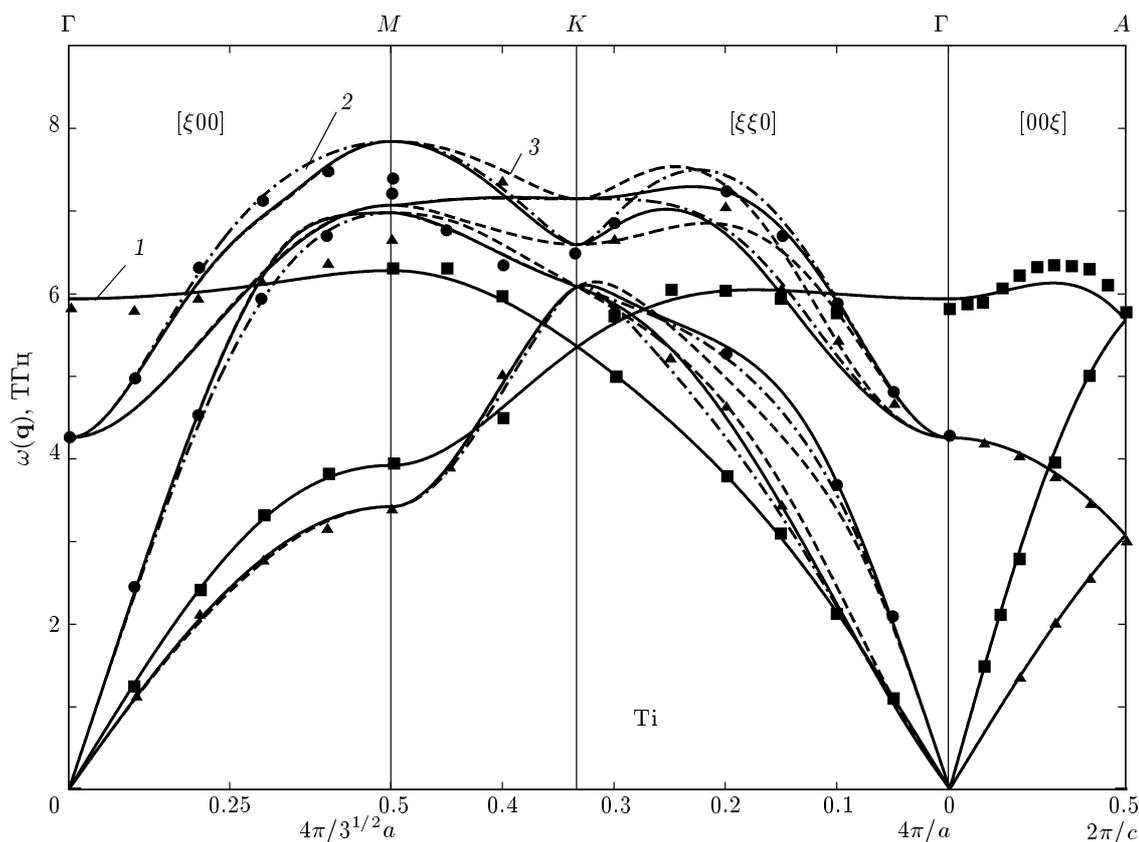


Рис. 3. Фононный спектр Ti. Символы — экспериментальные значения из работы [15]. Расчетные кривые: 1 — модель $ba\alpha$, 2 — модель $ba\gamma$, 3 — модель $ba\beta$

литическим и традиционными подходами.

Результаты наших расчетов представлены на рис. 1–6 и в таблице. Отметим, что в используемом подходе вся экспериментальная информация о спектре фононов содержится в значениях фононных частот $\omega_i(N)$ в точках симметрии зоны Бриллюэна. В качестве этих $\omega_i(N)$ в Ti и Co используем значения, соответствующие интерполяциям БК, предложенным авторами работы [15] для описания результатов своих измерений. В Tb все частоты $\omega_i(N)$, кроме $\omega(L_{1O})$, берутся равными их экспериментальным значениям, приведенным в работе [4], значение же $\omega(L_{1O})$ выражается через остальные $\omega_i(N)$ по уравнению связи (67). Аналогично, в Sc экспериментальные значения из работы [8] используются для всех $\omega_i(N)$, кроме $\omega(L_{1O})$ и $\omega(L_{1A})$, а эти две частоты определяются из уравнения связи (67) так, чтобы отклонения от экспериментальных значений для них были примерно одинаковыми. Рисунки 1 и 2 показывают, что получающиеся при этом отклонения как в Tb, так и в Sc практически лежат в пределах точности измерений, так что с этой точностью соотноше-

ния связи (67), справедливые для моделей GTF-9, в Tb и Sc выполняются.

Результаты, представленные на рис. 1–4, иллюстрируют «многовариантность» решений обсуждаемой задачи построения динамической матрицы по экспериментальному спектру фононов ω_i . На каждом из этих рисунков приводятся три теоретические кривые, соответствующие упомянутым выше различным вариантам **S** решения данной задачи. Кривые нумеруются так, что с ростом номера точность описания экспериментальных ω_i несколько понижается. Но все эти кривые, особенно кривые 1 и 2, обычно весьма близки, и на многих направлениях зоны Бриллюэна они практически или точно совпадают. Расчеты для других вариантов **S** (не показанные на рисунках) согласуются с опытом несколько хуже, чем кривые 3, но для каждого из металлов существует еще два–три варианта **S**, неплохо описывающих эксперимент. В то же время таблица показывает, что динамические матрицы для этих разных вариантов часто весьма различны; так, знаки параметров БК a_1 и a_3 в вариантах γ и δ противо-

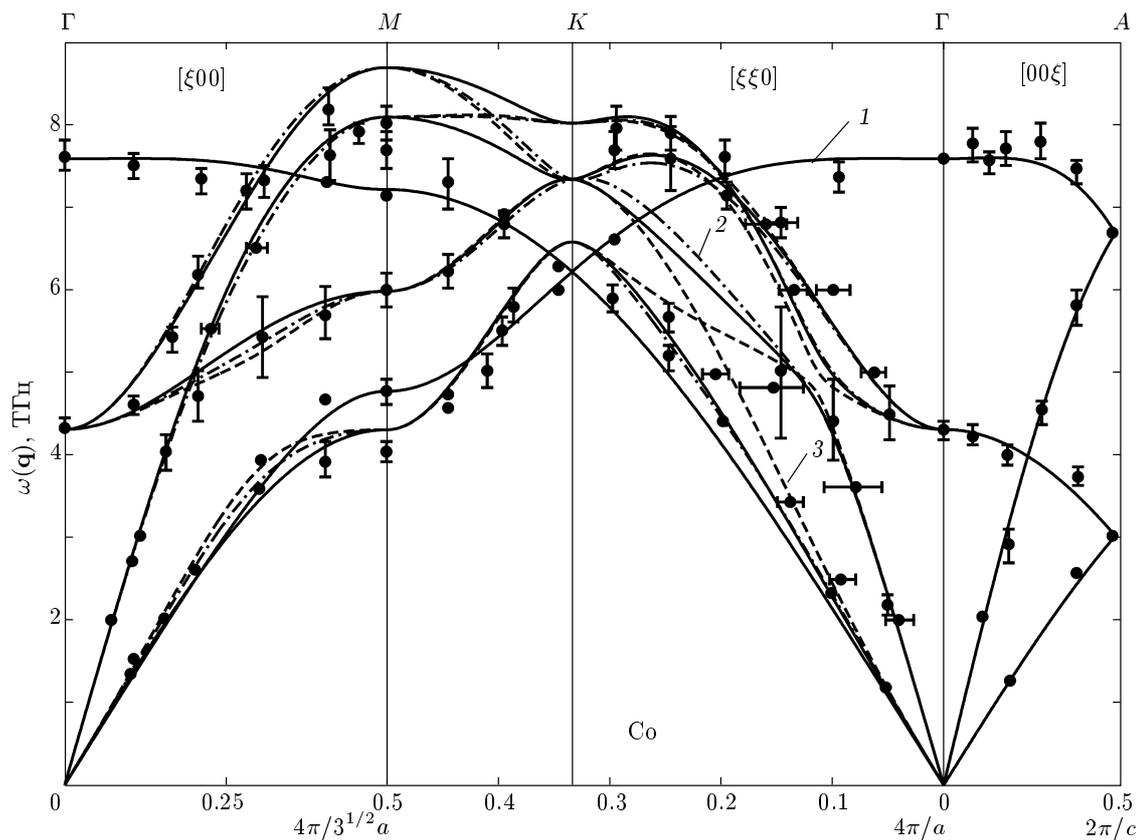


Рис. 4. Фононный спектр Co. Символы — экспериментальные значения из работы [15]. Расчетные кривые: 1 — модель баδ, 2 — модель баγ, 3 — модель баβ

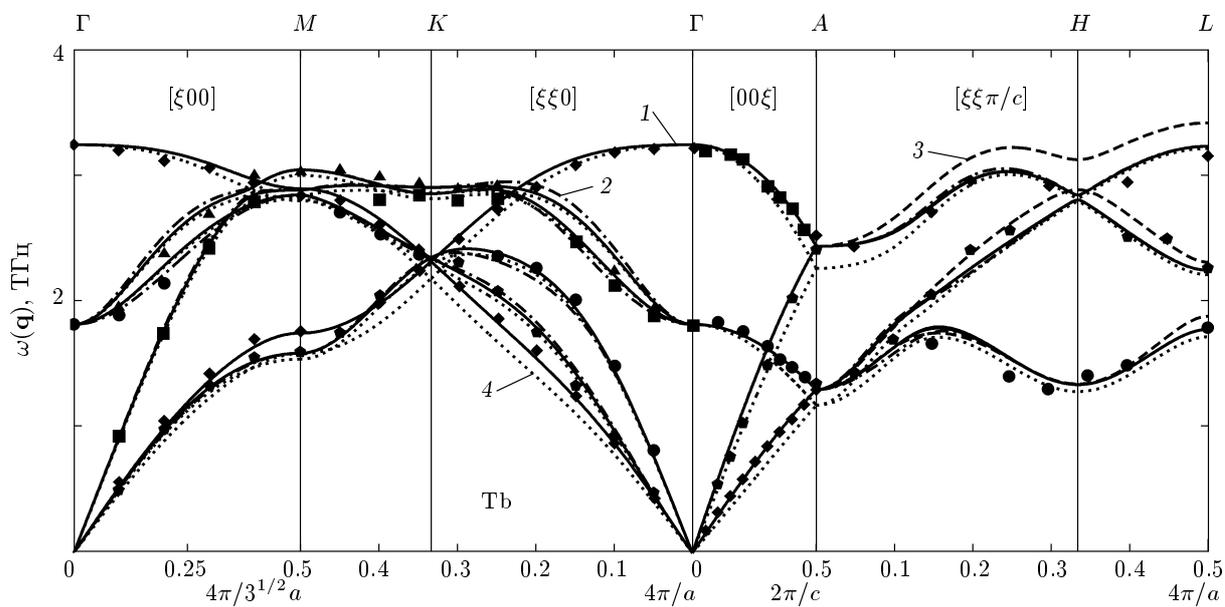


Рис. 5. Фононный спектр Tb. Расчетные кривые: 1 — модели 7aα и 7bα, 2 — модель 7cα, 3 — модель баα, 4 — модель ба'α

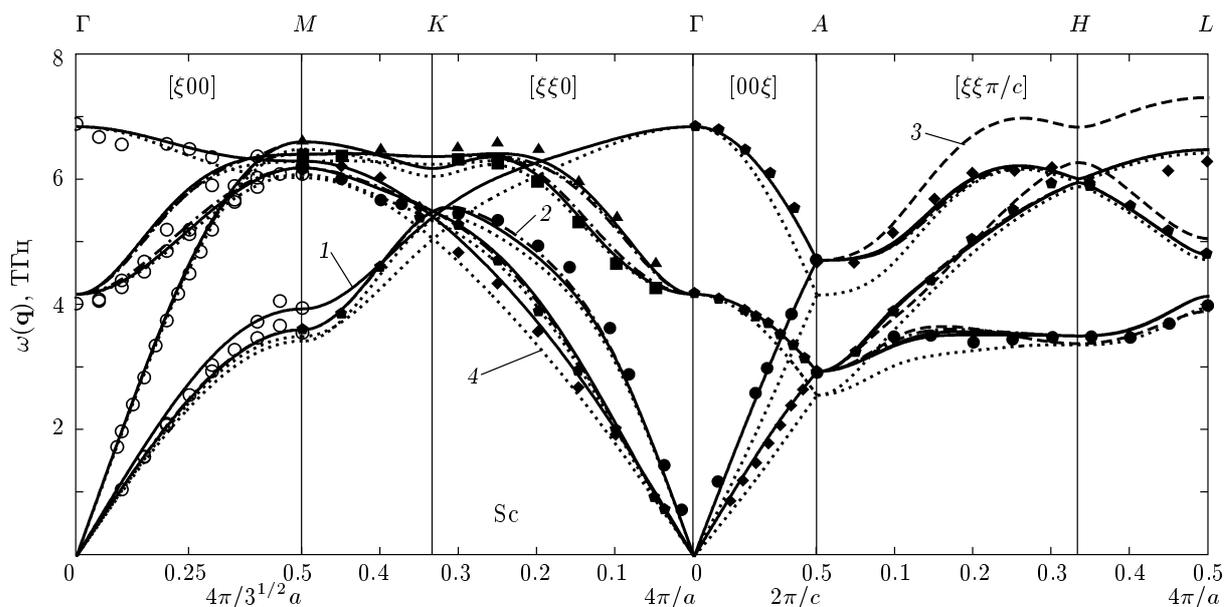


Рис. 6. Фононный спектр Sc. Обозначения кривых — те же, что на рис. 5

положны знаку этих параметров в вариантах α и β . Отметим также, что для титана параметры БК модели взаимодействий шести соседей, предложенной в работе [15], очень близки к параметрам нашей модели Ti-6 $\alpha\gamma$. Для тербия и скандия в работах [4] и [8] использовались модели взаимодействий восьми соседей, так что их сравнение с нашей моделью GTF-7 является не прямым, но и в этих моделях параметры БК для трех первых координационных сфер близки по знаку и величине к аналогичным параметрам моделей Tb-7 $\alpha\gamma$ и Sc-7 $\alpha\gamma$. В то же время «лучшие» кривые 1 на рис. 1–4 очень близки к аналогичным кривым работ [4], [8] и [15], полученным традиционными методами. Все это иллюстрирует неоднозначность построения динамической матрицы по экспериментальным спектрам ω_i и в то же время показывает, что предлагаемый аналитический подход позволяет находить все решения данной задачи. Для выбора из этих решений «истинной», физически реалистичной динамической матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ могут быть полезными расчеты из первых принципов типа выполнявшихся для Zn [23] и Ru [17], даже при наличии возможных погрешностей этих расчетов, поскольку здесь важно установить хотя бы знаки параметров a_1 и a_3 . Однако для обсуждаемых металлов такие расчеты нам не известны. Другой возможностью разрешения данной неоднозначности является использование данных об интенсивностях рассеяния или «неупругих» структурных факторах [18], но пока та-

кие подходы использовались, видимо, только для Zn [18] и Ru [17].

Рисунки 5 и 6 иллюстрируют методические аспекты обсуждаемых проблем. Кривые 1 и 2 на этих рисунках показывают, что выбор дополнительных условий к модели GTF-7, описываемых формулами (104)–(106), мало влияет на частоты ω_i и динамическую матрицу $\mathbf{D}(\mathbf{k})$. Для моделей 7 $\alpha\alpha$ и 7 $b\alpha$ значения ω_i и $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ практически совпадают, а для модели 7 $c\alpha$, (которая описывает ω_i несколько хуже, чем модели 7 $\alpha\alpha$ и 7 $b\alpha$) различия не превышают нескольких процентов. Кривые 3 на рис. 5 и 6 иллюстрируют возможные погрешности описания фононов во всей зоне Бриллюэна моделями GTF-6, построенными на основании данных только для направлений ГКМГА, в частности, моделью 6 $\alpha\alpha$, используемой нами для Ti и Co. Видно, что погрешности описания фононов на направлениях АНЛ при этом могут составлять 10–15%. Кривая 4 иллюстрирует роль взаимодействий седьмых соседей в моделях GTF-7. Видно, что значения соответствующих параметров БК в таблице относительно малы, и их влияние на спектры ω_i обычно невелико. Однако в окрестности точки А это влияние усиливается, так что в этой области зоны Бриллюэна эффекты дальнего действия наиболее существенны. Это качественно согласуется с выводами других обсуждений проявлений дальнего действия в фононных спектрах ГПУ-металлов [15, 22].

Параметры Борна – Кармана (в дн/см) для различных моделей Tb, Sc, Ti и Co

n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n
Мо- дель	Tb-7a α					Tb-7a β					Tb-7a γ				
1	5924	-3748	-10191	7850		5872	-3299	-10191	7850		-5758	-267	-10191	7850	
2	-9797	-931	596		-2808	-9797	-931	596		-2808	-9797	-931	596		-2808
3	-4615	-542	1189	295		-5232	-234	1189	295		3375	-276	1189	295	
4		713	387				713	387				713	387		
5	435	163	-84	-545		615	-139	-84	-545		-1014	-64	-84	-545	
6	-972	-475	-475			-972	-475	-475			-972	-475	-475		
7	-148	-60	-356	-234	0	-148	-60	-356	-234	0	-148	-60	-356	-234	0
Мо- дель	Tb-7b α					Tb-7c α					Tb-6a α				
1	5924	-3748	-10191	7897		5777	-3878	-10191	7897		5924	-3748	-10191	-9182	
2	-9851	-918	622		-2785	-10802	-442	622		-2785	-10094	-1050	-117		-2808
3	-4615	-542	1189	323		-3518	-1091	1189	323		-4615	-542	1189	0	
4		673	468				673	468				-88	-1751		
5	435	163	-84	-481		947	8	-84	-481		435	163	-84	225	
6	-972	-475	-475			-1923	0	-475			-972	-475	-475		
7	-121	-66	-370	-192	-12	-121	-66	-370	-192	-12	0	0	0	0	0
Мо- дель	Sc-7a α					Sc-7a β					Sc-7a γ				
1	8128	-5632	-11989	6786		8008	-4686	-11989	6786		-8153	-41	-11989	6786	
2	-14436	-859	-704		-2609	-14436	-859	-704		-2609	-14436	-859	-704		-2609
3	-5170	-1072	1571	-1237		-6608	-353	1571	-1237		5352	-1174	1571	-1237	
4		1568	4509				1568	4509				1568	4509		
5	964	-24	-578	702		1383	-678	-578	702		-879	-407	-578	702	
6	-2282	368	368			-2282	368	368			-2282	368	368		
7	-86	-213	-605	-137	0	-86	-213	-605	-137	0	-86	-213	-605	-137	0
Мо- дель	Sc-7b α					Sc-7c α					Sc-6a α				
1	8128	-5632	-11989	6788		8241	-5547	-11989	6788		8128	-5632	-11989	-12105	
2	-14311	-890	-766		-2663	-13575	-1258	-766		-2663	-14608	-1285	-1914		-2609
3	-5170	-1072	1571	-1232		-6019	-647	1571	-1232		-5170	-1072	1571	0	
4		1662	4321				1662	4321				31	878		
5	964	-24	-578	504		568	103	-578	504		964	-24	-578	502	
6	-2282	368	368			-1546	0	368			-2282	368	368		
7	-148	-198	-574	-236	27	-148	-198	-574	-236	27	0	0	0	0	0

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перечислим основные результаты настоящей работы. Даны аналитические выражения для динамической матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ и упругих модулей C_{ik} в ГПУ-кристалле через параметры Борна – Кармана.

Эти выражения позволяют просто вычислять значения матричных элементов $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ и модулей C_{ik} для взаимодействий любого числа соседей n_{max} . На основе этих выражений указан ряд соотношений между частотами $\omega_i(N)$ в различных точках

Продолжение

n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n
Мо- дель	Ti-6a α					Ti-6a γ					Ti-6a β				
1	9791	-7148	-10540	-18092		-9744	-2416	-10540	-14642		9385	-3657	-10540	-22008	
2	-22507	-230	-3840		-3100	-22507	-230	-3840		-3100	-22507	-230	-3840		-3100
3	-4814	-3754	2400	0		4461	1575	2400	0		-9694	-1314	2400	0	
4		-324	-11420				-324	-11420				-324	-11420		
5	545	1579	-515	283		-710	-259	-515	-369		1968	-776	-515	1023	
6	-3563	25	25			-3563	25	25			-3563	25	25		
Мо- дель	Co-6a δ					Co-6a γ					Co-6a α				
1	-12888	1649	-21063	-19191		-3549	-3716	-21063	-22867		4532	-5003	-21063	-11841	
2	-42040	1895	-4243		25	-42040	1895	-4243		25	-42040	1895	-4243		25
3	-2627	689	2443	0		-9538	6572	2443	0		2170	-5878	2443	0	
4		162	-15406				162	-15406				162	-15406		
5	-1066	253	37	-566		242	-1267	37	128		-3680	2615	37	-1955	
6	-131	80	80			-131	80	80			-131	80	80		

симметрии зоны Бриллюэна N , а также между $\omega_i(N)$ и модулями C_{ik} , которые справедливы для обычно используемых моделей с $n_{max} = 6$, $n_{max} \leq 9$ и $n_{max} \leq 11$. Экспериментальная проверка этих соотношений позволяет оценить применимость каждой из этих моделей к реальным ГПУ-металлам. Показано, что обычный метод оценки параметров Борна–Кармана из подгонки вычисленных фононных частот к наблюдаемым в ГПУ-кристаллах не однозначен. Указан аналитический метод нахождения всех решений данной задачи на основе данных о $\omega_i(N)$ и о модулях C_{ik} . Этот метод проиллюстрирован построением динамических матриц для Ть, Sc, Тi и Со и показано, что матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{k})$, предложенные для этих металлов ранее, являются только одним из возможных вариантов решения данной задачи. Поэтому в тех приложениях, в которых важен не только спектр частот, но и сама матрица $\mathbf{D}(\mathbf{k})$, для выбора из этих нескольких вариантов физически реального нужно использовать дополнительные критерии, например, сравнение с расчетами $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ из первых принципов, или данные о структурных факторах неупругого рассеяния.

Авторы глубоко благодарны Ю. Н. Горностыреву и А. С. Иванову за ценные советы, а также Исследовательско-технологическому центру «Аусферр», г. Магнитогорск, за поддержку этой работы. Рабо-

та выполнена также при поддержке РФФИ (грант № 06-02-16557).

ЛИТЕРАТУРА

1. М. Борн, Хуан Кунь, *Динамика кристаллических решеток в гармоническом приближении*, Изд-во иностр. лит., Москва (1958), гл. 5.
2. E. C. Svensson, B. N. Brockhouse, and J. M. Rowe, *Phys. Rev.* **155**, 619 (1967).
3. R. E. DeWames, T. Wolfram, and G. W. Lehman, *Phys. Rev.* **138**, A717 (1965).
4. J. C. Glyden Houmann and R. M. Nicklow, *Phys. Rev. B* **1**, 3943 (1970).
5. R. M. Nicklow, N. Wakabayashi, and P. R. Vijayaraghavan, *Phys. Rev. B* **3**, 1229 (1971).
6. N. Wakabayashi, S. K. Sinha, and F. H. Spedding, *Phys. Rev. B* **4**, 2398 (1971).
7. R. Pynn and G. L. Squires, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **326**, 347 (1972).
8. J. Pleschiutchnig, O. Blaschko, and W. Reichardt, *Phys. Rev. B* **44**, 6794 (1991).
9. В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов, *ЖЭТФ* **133**, 313 (2008).

10. А. Г. Хачатурян, *Теория фазовых превращений и структура твердых растворов*, Наука, Москва (1974).
11. S. V. Beiden and V. G. Vaks, *Phys. Lett. A* **163**, 209 (1992).
12. M. S. Blanter, E. B. Granovsky et al., *J. Alloys Comp.* **335**, 1 (2002); **345**, 1 (2002).
13. В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов, *ЖЭТФ* **133**, 115 (2008).
14. H. R. Schober and P. H. Dederichs, in: *Landolt-Börnstein*, Vol. 13 A, Metals, Springer, Berlin (1992), p. 1.
15. N. Wakabayashi, R. H. Scherm, and H. G. Smith, *Phys. Rev. B* **25**, 5122 (1982).
16. A. P. Roy, B. A. Dasannacharya, C. L. Thaper, and P. K. Iyengar, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 906 (1973).
17. R. Heid, L. Pitchovius, W. Reichardt, and K.-P. Bohnen, *Phys. Rev. B* **61**, 12059 (2000).
18. N. J. Chesser and J. D. Axe, *Phys. Rev. B* **9**, 4060 (1974).
19. *Second and Higher Order Elastic Constants*, ed. by A. Every and A. McCurdy, Landolt-Börnstein New Series, Group III, Vol. 29a, Springer, Berlin (1992), p. 105.
20. J. L. Warren, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 38 (1968).
21. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, Москва (1978), табл. 1.4.
22. V. G. Vaks and K. Yu. Khromov, *Phys. Rev. B* **75**, 212103 (2007).
23. G. Gilat, G. Rizzi, and G. Cubiotti, *Phys. Rev.* **185**, 971 (1969).