

осцилляторов от примесных к зонным состояниям в области высоких температур, происходящих вследствие взаимодействия между ними и проявляющихся в спектрах оптического поглощения [6,7].

Таким образом, в системе $\text{CdI}_2\text{-Cd}$ обнаружены аномальные концентрационные и температурные зависимости примесной СЧ ФЭС. Они объясняются в рамках модели, учитывающей изменения характера взаимодействия сверхстехиометрических атомов Cd; с решеточными атомами иода и между собой при увеличении их концентрации.

Авторы выражают глубокую признательность Р.М. Турчаку за предоставленные для исследований образцы кристаллов.

Список литературы

- [1] Матковский А.О., Гальчинский А.В., Болеста И.М., Сугак Д.Ю., Савицкий И.В., Кушнир Н.О. УФЖ **32**, 6, 922 (1987).
- [2] Широкозонные слоистые кристаллы и их физические свойства / Под ред. А.Б. Лысковича. Львов (1982). 148 с.
- [3] Китык И.В. ФТТ **33**, 6, 1826 (1991).
- [4] Coehoorn R., Sawatzky G.A., Haas C. de Groot R.A. Phys. Rev. **B11**, 6739 (1975).
- [5] Довгий Я.О., Китык И.В., Александров Ю.М., Колобанов В.Н., Махов В.Н., Михайлин В.В. ЖПС **43**, 4, 650 (1985).
- [6] Болеста И.М., Китык И.В., Турчак Р.М. УФЖ **39**, 5, в печати (1994).
- [7] Довгий Я.С., Вилый Я.М., Козак А.М. Письма в ЖЭТФ **36**, 4, 474 (1976).

© Физика твердого тела, том 37, № 5, 1995
Solid State Physics, vol. 37, N 5, 1995

ОБ ОДНОЙ НЕТОЧНОСТИ В МОНОГРАФИИ М.БОРНА И Х.КУНЯ «ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК»

С.С.Секоян

Москва

(Поступило в Редакцию 27 октября 1994 г.)

Борновская теория кристаллических решеток в настоящее время широко используется для расчета упругих, тепловых, оптических и других свойств твердых тел. Вместе с тем одна из приведенных в монографии [1] формул, связывающая сжимаемость с другими характеристиками кристалла, ошибочна и ее использование может привести к неверным результатам. Речь идет о формуле (9.29), которая в [1], как и в оригинале [2] имеет следующий вид

$$\frac{1}{\beta} = \frac{M\tau_0^2}{3v_a}k,$$

где β — сжимаемость, M — координационное число, τ_0 — расстояние между ближайшими соседями в кристаллической решетке, v_a — объем

одной ячейки, k — силовая постоянная. В [1] формула (9.29) выводится из выражения (стр. 130)

$$\frac{1}{\beta} = \frac{Mr_0^2}{9v_a} \left\{ \varphi''(r_0) + \frac{2\varphi'(r_0)}{r_0} \right\}$$

и формулы (9.25), имеющей вид

$$k = \frac{M}{3} \left\{ \varphi''(r_0) + \frac{2\varphi'(r_0)}{r_0} \right\},$$

где $\varphi(r)$ — потенциал взаимодействия, $\varphi'(r)$ и $\varphi''(r)$ — первая и вторая производные $\varphi(r)$ по r . Из приведенных выше двух выражений непосредственно следует

$$\frac{1}{\beta} = \frac{r_0^2}{3v_a} k.$$

Таким образом, в формуле (9.29) должно быть опущено координационное число M , как и в следующей за ней формуле (9.30). В этом легко убедиться, сравнив формулу (9.30) с аналогичными (правильными) формулами Сцигети [3], Лейбфрида [4] и др.

В сравнительно недавно опубликованной работе [5] формула (9.29) положена в основу расчета изменений энтропии кристаллов при полиморфных превращениях. Естественно, что для теоретической интерпретации экспериментальных зависимостей автору работы [5] пришлось сделать неправильное предположение (вторая сноска на стр. 355 работы [5]) и тем самым как-то компенсировать неверность исходного соотношения, основанного на неправильной формуле (9.29). Отметим кстати, что именно сравнение расчетов, выполненных в [5], с расчетами в обстоятельной работе [6], посвященной той же проблеме, показало их качественное различие и натолкнуло нас на мысль о необходимости проверки правильности формулы (9.29) в монографии [1].

Список литературы

- [1] Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М. (1958). 488 с.
- [2] Born M., Kun H. Dynamical theory of crystal lattice. Oxford (1985).
- [3] Szigeti B. Proc. Roy. Soc. A204, 1076, 51 (1950).
- [4] Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М. (1963). 312 с.
- [5] Урусов В.С. ДАН СССР 290, 2, 354 (1986).
- [6] Jeanloz R. Effect on coordination change on the thermodynamic properties. High Pressure research in geophysics. Tokyo (1982). P. 479-498.