

# О соотношении Борна для кристаллических решеток типа алмаза и сфалерита

© В.П. Михальченко

Институт термоэлектричества Национальной академии наук Украины,  
58002 Черновцы, Украина

E-mail: mikhalchenko@ite.cv.ua

(Поступила в Редакцию 27 мая 2002 г.  
В окончательной редакции 11 июля 2002 г.)

По экспериментальным данным упругих постоянных  $C_{ij}$  кристаллов со структурой алмаза и сфалерита при  $T = 293$  К проверено соотношение Борна:  $\Lambda = 4C_{11}(C_{11} - C_{44})/(C_{11} + C_{12})^2 = 1$ . Показано, что для алмаза вследствие большого разброса экспериментальных данных  $C_{ij}$  оно выполняется плохо, а для Si, SiC, Ge и  $\alpha$ -Sn выполняется с точностью до 8.3, 7.6, 1.6 и 1.0% соответственно. Для соединений типа  $A^{III}B^V$ ,  $A^{II}B^{VI}$  и  $A^IVB^{VII}$  со структурой сфалерита установлено систематическое отклонение  $\Lambda$  от единицы в меньшую сторону и показано, что величина  $(1 - \Lambda)$  может быть использована для оценки степени ионности связи в этих кристаллах. Оценено влияние ангармонизма на величины  $\Lambda$  для Ge, Si, GaAs, InAs и Zn,Se, которое оказалось незначительным.

Полученное Борном в 1914 г. [1] соотношение между упругими постоянными  $C_{ij}$  кристаллов кубической симметрии с решеткой алмаза имеет вид

$$\Lambda = \frac{4C_{11}(C_{11} - C_{44})}{(C_{11} + C_{12})^2} = 1. \quad (1)$$

Лишь 32 года спустя, когда компоненты  $C_{ij}$  алмаза были измерены ультразвуковым методом [2], удовлетворительное согласие (1) с экспериментом ( $\Lambda_{ex} = 1.1$ ) было прокомментировано Борном в докладе на международной конференции по динамике кристаллических решеток в 1964 г. [3]. Впоследствии было опубликовано еще 5 работ, в которых  $C_{ij}$  природных монокристаллов алмаза измерены рентгенографическим и прецизионными акустическими методами [4–8] (табл. 1).

Из табл. 1 следует, что только по данным [2,4] соотношение (1) выполняется удовлетворительно, однако по данным более поздних прецизионных измерений  $C_{ij}$  [6,8] соотношение Борна фактически не выполняется. Это обусловлено не столько недостатками двухпараметрической силовой модели Борна, сколько слишком большим разбросом значений недиагональных компонент  $C_{12}$ , измеряемых с меньшей точностью, чем  $C_{11}$  и  $C_{44}$ , которые в свою очередь также существенно различаются.

Таким образом, монокристаллы природных алмазов являются весьма ненадежным объектом для прецизионного определения их упругих свойств акустическими методами: малые размеры образцов, различная плотность, дефекты и примеси в зависимости от месторождения и др. (см., например, [7,9]).

Можно полагать, что такое стечение обстоятельств стимулировало дальнейшие исследования, в которых соотношение (1) было модифицировано различными авторами путем усложнения базовой модели Борна применительно к алмазоподобным структурам (см., например, [10,11]).

Тем не менее в [10] отмечалось (Табл. XIII), что для Ge, Si, ZnS, InSb и InAs соотношение (1) выполняется

намного точнее, чем модифицированное по Харрисону, на что специально обращал внимание автор обзора [10].

В известной работе Китинга [12] модифицированное им соотношение (1) выполняется с точностью до 0.6 и 1% для алмаза и Si соответственно, однако для Ge с точностью до 9%, что значительно хуже, чем оригинальное соотношение Борна (1), которое выполняется для Ge с точностью 1.6% (см. далее). В связи с этим уместно подчеркнуть, что замечание Китинга о недостатке базовой модели Борна, которая приводит к отрицательному значению дилатационной упругой податливости  $S_{11}$ , нельзя признать справедливым, поскольку  $S_{11} < 0$  выполняется только при условии, что силовая постоянная центрального взаимодействия в решетке алмаза  $\alpha'$  меньше таковой нецентрального  $\beta'$ : неравенство  $\alpha' < \beta'$  для любых беспараметрических кристаллических решеток нереально. Второй недостаток модели Борна (о зависимости модуля всестороннего сжатия  $B$  от  $\beta'$ ) нельзя признать существенным, поскольку даже в усложненной модифицированной модели Китинга величина  $B$  также зависит от  $\beta$  — силовой

**Таблица 1.** Упругие постоянные  $C_{ij}$  (в ед.  $10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup>) и величины  $\Lambda$  алмаза

$T, K$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$\Lambda$	Литературная ссылка	Методика эксперимента
293	95.0	39.0	43.0	1.10	[2]	акустическая
298	93.2	41.1	41.6	1.06	[4]	акустическая
573	110.0	33.0	44.0	1.42	[5]	рентгенографическая
300	107.6	12.5	57.6	1.49	[6]	акустическая прецизионная
298	107.6	27.5	51.9	1.31	[7]	акустическая прецизионная
298	107.9	12.4	57.8	1.494	[8]	акустическая прецизионная

константы нецентрального взаимодействия со вторыми по близости соседями (поэтому кажется неестественным, что по Китингу во всех неметаллических кристаллах нецентральное взаимодействие ближайших соседей должно отсутствовать).

При обобщении модели Китинга применительно к сфалеритной решетке [13] потребовались дополнительные силовые константы, вследствие чего модифицированное в [13] соотношение Борна выполняется с точностью до 7.4, 11.3 и 13.1% для GaAs, InAs и ZnSe соответственно, в то время как оригинальное соотношение (1) выполняется для этих соединений фактически с такой же точностью (см. далее табл. 3).

Таким образом, становится очевидным, что в длинноволновом пределе динамики решетки оригинальное соотношение Борна (1) по существу не хуже модифицированных различными авторами и его корректная встесторонняя проверка представляет определенный интерес.

В связи с этим немного удивляет, что в обстоятельной монографии [11], в которой проведен детальный анализ и сопоставление нескольких модификаций соотношения Борна (1) для решеток типа алмаза, оригинальное соотношение (1) применительно к решеткам типа сфалерита авторами не проверялось.

В настоящей работе осуществлена проверка соотношения (1) для соединений типа  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^{V}$  и  $A^{IV}B^{IV}$  со смешанной ионно-ковалентной связью, включая рассмотренные ранее в [11] „квазиклассические“ ковалентные кристаллы Ge, Si, SiC и  $\alpha$ -Sn. Кроме того, для некоторых из них, в отличие от [11], оценено влияние ангармонизма на величину  $\Lambda$ . Также показано, что даже без учета ангармонического вклада в  $\Lambda$  систематическое отклонение  $\Lambda$  от единицы в меньшую сторону для соединений со структурой сфалерита может быть использовано в качестве оценки степени ионности связей в этих кристаллах.

## 1. Результаты проверки соотношений Борна (1) и их обсуждение

Строго говоря, для корректной проверки соотношения (1) необходимы величины „гармонических“ значений  $C_{ij}$ , получаемых путем линейной экстраполяции температурных зависимостей  $C_{ij}(T)$  из классической области температур  $T > \Theta_D$  ( $\Theta_D$  — температура Дебая) на  $T = 0$  К [14]. Используя приведенные в [11] значения  $\tilde{C}_{ij}$  и  $C_{ij}$  при  $T = 293$  К, содержащие ангармонический вклад для Ge, Si, InAs, GaAs и ZnSe, можно оценить влияние ангармонизма колебаний кристаллической решетки на величину  $\Lambda$ .

В табл. 2 для этих кристаллов приведены значения  $\Lambda(293)$  при  $T = 293$  К,  $\Lambda(0)$  при  $T = 0$  К, а также параметры Грюнайзена  $\gamma$  и коэффициенты объемного расширения  $\beta$  (в ед.  $10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ) при  $T = 293$  К, заимствованные из [15], произведение которых  $\gamma\beta$  является обобщенной

**Таблица 2.** Значения  $\Lambda(293)/\Lambda(0)$ , учитывающие ангармонизм

Кристалл	$\gamma$	$\beta$	$\gamma\beta$	$\Lambda(293)$	$\Lambda(0)$	$\Lambda(293)/\Lambda(0)$
Ge	0.72	17.4	12.53	1.016	1.018	0.998
Si	0.45	7.5	3.37	1.083	1.089	0.994
InAs	0.58	13.23	7.67	0.882	0.880	1.002
GaAs	0.52	17.4	9.05	0.940	0.941	0.998
ZnSe	0.65	21.42	13.92	0.825	0.826	0.998

мерой ангармоничности колебаний кристаллических решеток [16].

Анализируя данные табл. 2, можно убедиться в том, что ангармоничность не оказывает заметного влияния на величину  $\Lambda$ , по-видимому, вследствие того, что в ковалентных кристаллах при  $T > \Theta_D$  все три независимых  $C_{ij}$  обнаруживают, как правило, линейный спад с ростом температуры, т.е.  $dC_{ij}/dT < 0$ , и небольшое различие в наклонах [11].

Тем не менее для некоторых кристаллов с ионно-ковалентной связью могут иметь место „аномальные“ зависимости  $C_{ij}(T)$ , т.е. размягчение некоторых  $C_{ij}$  (обычно недиагональных компонент  $C_{12}$ ) и  $dC_{12}/dT > 0$ , вследствие чего ангармоничность в таких кристаллах может оказаться более существенной при расчетах  $\Lambda$ .

При внимательном рассмотрении данных табл. 2 оказалось несколько неожиданным, что для Si, обладающего наименьшим произведением  $\gamma\beta$ , т.е. наименьшей степенью ангармоничности, обнаруживается наибольшее отклонение  $\Lambda(293)/\Lambda(0)$  от единицы. Причиной этого могут быть не только различия в наклонах  $dC_{ij}/dT$  для Si по сравнению с другими кристаллами табл. 2, но и некоторый произвол процедуры линейной интерполяции  $C_{ij}(T)$  из области высоких температур  $T > \Theta_D$  на  $T = 0$  вследствие слабой нелинейности  $C_{ij}(T)$  в окрестности  $T < \Theta_D$  (среди приведенных в табл. 2 кристаллов у Si наибольшая величина  $\Theta_D$ ). С другой стороны, даже при центральном взаимодействии ближайших соседей, но с учетом ангармоничности, соотношение Коши  $C_{12} = C_{44}$  нарушается, и, как показано в [14] (соотношение 15.27), для беспараметрических решеток кристаллов кубической симметрии разность  $C_{12} - C_{44}$  равна

$$C_{12} - C_{44} = -\frac{27s}{V_Z} \gamma^2 kT, \quad (2)$$

где  $\gamma$  — параметр Грюнайзена,  $s$  — число атомов в элементарной ячейке,  $k$  — постоянная Больцмана,  $V_Z$  — объем элементарной ячейки (существенно отметить, что допущения, при которых получено (2), не влияют ни на знак, ни на температурную зависимость величины  $C_{12} - C_{44}$ ).

С этой точки зрения, вклад в  $C_{ij}$  центральных взаимодействий для решетки Si является наименьшим по сравнению с другими кристаллами из табл. 2, что может

**Таблица 3.** Упругие постоянные  $C_{ij}$  (в ед.  $10^{10}$  Па), отклонения от соотношений Коши  $C_{12}-C_{44}$ , величины  $\Lambda$  и степени ионности по шкалам Филлипса  $f_i$ , Баженова  $f_i^B$  кристаллов с решетками типа алмаза и сфалерита при  $T = 293$  К

Кристалл	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$C_{12}-C_{44}$	$\Lambda$	$1-\Lambda$	$f_i$	$f_i^B$
Ge	12.60	4.40	6.77	-2.33	1.016		0	0
Si	16.01	5.78	8.00	-2.22	1.083		0	0
$\beta$ -SiC	41.05	16.43	19.38	-2.95	1.076		0	0
$\alpha$ -Sn	7.45	3.48	3.40	+0.080	1.01		0	0
AlP	13.82	6.065	6.90	-0.835	0.967	0.033	0.307	0.321
AlSb	8.939	4.427	4.155	+0.27	0.795	0.205	0.426	0.214
GaP	14.11	6.349	7.034	-0.685	0.9545	0.046	0.374	0.347
GaAs	11.76	5.268	5.965	-0.697	0.940	0.060	0.310	0.314
GaSb	8.839	4.033	4.316	-0.283	0.9651	0.032	0.261	0.270
InP	10.22	5.76	4.60	+1.16	0.899	0.101	0.421	0.414
InAs	8.337	4.538	3.952	+0.586	0.882	0.118	0.367	0.381
InSb	6.472	3.265	3.071	+0.194	0.929	0.071	0.321	0.360
$\beta$ -ZnS	9.76	5.90	4.51	+1.39	0.829	0.171	0.623	0.668
ZnSe	8.029	4.509	3.985	+0.524	0.827	0.173	0.676	0.666
ZnTe	7.11	4.07	3.13	+0.94	0.905	0.095	0.546	0.630
CdS	7.33	5.09	3.02	+2.07	0.819	0.181	0.685	0.711
CdTe	5.350	3.681	1.994	+0.687	0.881	0.119	0.675	0.691
HgSe	6.05	4.50	2.24	+2.26	0.828	0.172	0.680	—
HgTe	5.08	3.58	2.05	+1.53	0.790	0.210	0.650	—
CuCl	4.25	3.90	2.10	+1.80	0.550	0.440	0.746	—
CuBr	3.91	3.26	1.95	+1.31	0.560	0.446	0.735	—
CuI	4.05	3.05	1.58	+1.47	0.793	0.207	0.692	—

влиять на величины наклонов  $dC_{ij}/dT$ , а следовательно, и на  $\Lambda$ .

Таким образом, исходя из анализа данных табл. 2, проверка соотношения Борна (1) может проведена и по экспериментальным данным  $C_{ij}$  при  $T = 293$  К, хотя не исключено, что для некоторых кристаллов типа  $A^{II}B^VI$ ,  $A^{III}B^V$  и  $A^IVB^{VII}$ , возможные „аномалии“  $C_{ij}(T)$  могут оказать более существенное влияние на  $\Lambda(293)/\Lambda(0)$ .

В табл. 3 приведены заимствованные из [11] экспериментальные данные  $C_{ij}$  при  $T = 293$  К для Ge, Si,  $\alpha$ -Sn и SiC, соединений типа  $A^{II}B^VI$ ,  $A^{III}B^V$  и трех соединений типа  $A^IVB^{VII}$  со смешанной ионно-ковалентной связью с решеткой типа сфалерита и рассчитанные по ним величины  $\Lambda$ . Там же приведены отклонения от соотношения Коши  $C_{12}-C_{44}$ , поскольку для кристаллов с чисто ковалентной связью или существенным перекрытием электронных оболочек атомов (ионов) имеет место неравенство  $C_{12}-C_{44} < 0$ , в то время как для металлов, большинства ионных и квантовых кристаллов —  $C_{12}-C_{44} > 0$  [17]. Для более всестороннего обсуждения результатов проверки соотношения (1) в табл. 3 приведены также заимствованные из [11] значения степени ионности по Филлипсу  $f_i$  и Баженову  $f_i^B$ .

Из табл. 3 следует, что соотношение (1) выполняется для Ge и  $\alpha$ -Sn практически точно: незначительные превышения величины  $\Lambda$  могут быть обусловлены некоторым разбросом значений  $C_{ij}$  этих кристаллов. Для Si и SiC

соотношение (1) выполняется с точностью 8.3 и 7.6% соответственно, т.е. не хуже некоторых модифицированных соотношений (1) (см. выше). Вместе с тем для типичных ковалентных кристаллов Ge, Si и  $\beta$ -SiC величины  $\Lambda \geq 1$  согласуются с отрицательной разностью  $C_{12}-C_{44} < 0$ . Положительная разность  $C_{12}-C_{44} > 0$  для  $\alpha$ -Sn, по-видимому, обусловлена металлизацией связи в его решетке.

В этом смысле обратным уникальным примером может служить хром — единственный металл кубической сингонии, для которого выполняется неравенство  $C_{12}-C_{44} < 0$ , т.е. должно иметь место значительное преобладание ковалентной составляющей связи в решетке Cr, что сказывается на его механических свойствах: хром является весьма хрупким среди всех пластичных материалов с гцк- и оцк-решетками (вследствие чего в свое время возникла известная проблема пластичности хрома). Интересно, что проверка соотношения (1) для хрома по данным  $C_{ij}$  при  $T = 293$  К, заимствованным из [18] ( $C_{11} = 3.500$ ,  $C_{12} = 0.678$  и  $C_{44} = 1.008$  в ед.  $10^{10}$  Па) приводит к значению  $\Lambda = 1.998$ , что с учетом восьми ближайших соседей в оцк-решетке хрома дает  $\Lambda/2 = 0.999 \approx 1$ .

Не придавая слишком серьезного значения этому курьезному факту, можно утверждать, что для хрома столь близкое совпадение  $\Lambda$  с единицей недвусмысленно указывает на ковалентный характер связи и существенное перекрытие  $3d$ -орбиталей в его оцк-решетке, ориентированных вдоль направлений  $\langle 111 \rangle$  [19]. К тому же, хром — единственный металл кубической симметрии, для которого термическое расширение отрицательно при низких температурах  $T < 40$  К, что является характерным свойством кристаллов с ковалентными связями [15].

Наиболее интересным и однозначным результатом проверки соотношения Борна (1) является то, что для всех без исключения соединений типа  $A^{II}B^VI$ ,  $A^{III}B^V$  и  $A^IVB^{VII}$ , приведенных в табл. 3, установлено систематическое отклонение  $\Lambda$  от единицы в меньшую сторону. Это означает, что в рассматриваемых кристаллах существует некоторая степень ионности связей, которую естественно определить как разность  $1-\Lambda$  (для чисто ковалентной связи  $\Lambda = 1$ ).

Приведенные в табл. 3 значения степени ионности по шкале  $(1-\Lambda)$  в общем согласуются с величинами  $f_i$  и  $f_i^B$  по шкалам Филлипса и Баженова соответственно, хотя усматриваются некоторые расхождения между ними. Это может быть обусловлено не только точностью, с которой определяется  $(1-\Lambda)$ ,  $f_i$  или  $f_i^B$ , но и возможным разбросом экспериментальных величин  $C_{ij}$  табулированных соединений.

Точность определения  $\Lambda$  в 4 раза ниже точности определения компонент  $C_{ij}$  современными прецизионными методами физической акустики, т.е. может достигать величины 2–3%. Оценка точности определения  $f_i$  или  $f_i^B$  не столь однозначна, как  $\Lambda$ . Действительно, по определению  $f_i = E_c^2/E_g^2$ , где  $E_g$  — средняя ширина

**Таблица 4.** Ряды соединений, удовлетворяющих неравенству  $C_{12}-C_{44} < 0$ , упорядоченные по степени ионности по шкалам  $(1-\Lambda)$ ,  $f_i$  и  $f_i^B$

Шкалы	Соединения			
$(1-\Lambda)$	AlP (0.033)	GaSb (0.035)	GaP (0.046)	GaAs (0.060)
$f_i$	GaSb (0.261)	AlP (0.307)	GaAs (0.310)	GaP (0.374)
$f_i^B$	GaAs (0.270)	GaAs (0.314)	AlP (0.321)	GaP (0.374)

запрещенной зоны, а  $E_c$  — доля гетерополярной части  $E_g$ , т.е. точность определения  $f_i$  по крайней мере вдвое ниже  $E_g$  (0.1–0.2)%, однако оценка точности  $E_c$  достаточно затруднена. Тем не менее представляется интересным проанализировать предельные значения степени ионности в кристаллах табл. 3 следующими двумя способами.

1) По возрастанию степени ионности, но с сохранением типичных признаков ковалентности (по знаку отклонения от соотношения Коши  $C_{12}-C_{44} < 0$ ).

2) По убыванию степени ионности, но с сохранением неравенства  $C_{12}-C_{44} > 0$ , характерного для металлов и большинства ионных кристаллов. В первом случае можно составить соответствующие ряды (с указанием в скобках степени ионности), приведенные в табл. 4. Легко видеть, что для пар AlP, GaSb, GaP и GaAs, мало отличающихся между собой по степени ионности, наблюдается удовлетворительное согласие в ее определении как по шкалам  $(1-\Lambda)$ , так и по  $f_i$  или  $f_i^B$ . Таким образом, наименьшей степенью ионности среди приведенных в табл. 3 соединений, независимо от способа ее определения, обладают антимонид галлия, фосфид алюминия, фосфид и арсенид галлия (с сохранением ковалентности связи согласно неравенству  $C_{12}-C_{44} < 0$ ).

Начиная с величины  $(1-\Lambda) > 0.060$ , наблюдается положительное отклонение  $C_{12}-C_{44} > 0$  для всех соединений в табл. 3. Такая же ситуация сохраняется и для  $f_i > 0.374$  (хотя эта закономерность нарушается для InSb ( $f_i = 0.321$ ) и InAs ( $f_i = 0.337$ )) и для  $f_i^B > 0.374$  (нарушение закономерности для AlSb ( $f_i^B = 0.2141$ )).

Таким образом, проведенное в табл. 4 сопоставление данных по шкалам  $(1-\Lambda)$ ,  $f_i$  и  $f_i^B$  свидетельствует о том, что соотношение (1) позволяет оценивать степень ионности связей в сфалеритных решетках по шкале

$(1-\Lambda)$  не хуже, а с учетом изменений знака  $C_{12}-C_{44}$  быть может лучше, чем по  $f_i$  или  $f_i^B$ .

С другой стороны, близость степеней ионности в соединениях с отрицательным отклонением  $C_{12}-C_{44} < 0$  (табл. 3) требует, естественно, их уточнения с большей „разрешающей способностью“, чем по всем трем шкалам. По-видимому, здесь нет иного пути кроме рентген-дифрактометрических измерений Фурье-компонент структурных амплитуд, т.е. построения по ним карт распределения электронной плотности в этих кристаллах.

Во втором случае были составлены ряды для остальных четырнадцати соединений табл. 3, которые приведены в табл. 5. При первоначальном анализе рядов по шкалам  $(1-\Lambda)$  и  $f_i$ , видно, что они обе однозначно „прокалиброваны“ по степени ионности в начале и конце каждой из них. Более детальное рассмотрение показывает точное совпадение для ZnS (середина шкалы), InP и InSb (правый край шкалы). В начале шкал совпадения достаточно близки для хлорида и бромиды меди, хотя несколько большее различие для CuI (вследствие заниженного значения  $C_{44}$  по сравнению с CuCl и CuBr). Середина шкалы в целом обнаруживает удовлетворительное согласие для „родственных“ соединений CdTe, ZnTe и HgSe, HgTe.

Такая согласованность шкал  $(1-\Lambda)$  и  $f_i$  не является случайной, поскольку при составлении рядов для каждой из них тщательно сохраняется убывание степени ионности (в том числе и по шкале  $f_i^B$ ).

Можно таким образом прийти к заключению, что по шкале  $(1-\Lambda)$ , как и по шкале  $f_i$ , наибольшей степенью ионности обладают галоиды меди, промежуточной — селениды, сульфиды и теллуриды Hg, Cd, Zn и наименьшей — антимонид, фосфид и арсенид индия. Примерно такая же ситуация сохраняется и для шкалы  $f_i^B$  (хотя здесь отсутствуют галоиды меди).

Не вдаваясь в анализ возможных причин несколько больших различий в степенях ионности для ZnTe и HgSe по шкалам  $(1-\Lambda)$  и  $f_i$ , а также для AlSb и ZnSe по шкалам  $f_i$  и  $f_i^B$ , можно утверждать, что ее оценка по шкале  $(1-\Lambda)$  для рядов соединений, составленных и по убывающей степени ионности при сохранении неравенства  $C_{12}-C_{44} > 0$ , являются столь же правомерными, как и по шкалам  $f_i$  и  $f_i^B$ .

**Таблица 5.** Ряды соединений, удовлетворяющих неравенству  $C_{12}-C_{44} > 0$ , упорядоченные по степени ионности по шкалам  $(1-\Lambda)$ ,  $f_i$  и  $f_i^B$

Шкалы	Соединения													
$(1-\Lambda)$	CuBr (0.446)	CuCl (0.440)	HgTe (0.210)	CuI (0.207)	AlSb (0.205)	CdS (0.181)	ZnSe (0.173)	HgSe (0.172)	ZnS (0.171)	CdTe (0.119)	InAs (0.118)	InP (0.101)	ZnTe (0.095)	InSb (0.071)
$f_i$	CuCl (0.746)	CuBr (0.735)	CuI (0.692)	CdS (0.685)	HgSe (0.680)	ZnSe (0.676)	CdTe (0.675)	HgTe (0.650)	ZnS (0.623)	ZnTe (0.546)	AlSp (0.426)	InP (0.421)	InAs (0.367)	InSb (0.321)
$f_i^B$	—	—	—	CdS (0.711)	—	CdTe (0.691)	ZnS (0.668)	—	ZnS (0.666)	ZnTe (0.630)	InP (0.414)	InAs (0.381)	InSb (0.360)	AlSb (0.214)

Кроме того, проведенный анализ степеней ионности показывает, что ее определение по шкале  $(1-\Lambda)$  является более строгим и, главное, более однозначным, чем ее качественная оценка по отклонению от отношения Коши (например,  $C_{12}-C_{44} < 0$  для некоторых галонидов лития [11]).

С гносеологической точки зрения борновская атомистическая двухпараметрическая силовая модель кристаллических решеток типа алмаза, равно как и соотношение (1) (к сожалению, редко цитируемые в специальной литературе и фактически не рассматриваемые в известных учебниках и пособиях по физике твердого тела), не менее плодотворна, чем, например, однопараметрическая континуальная модель твердого тела Дебая, широко используемая и в настоящее время в исследованиях теплоемкости.

В заключение следует отметить, что соотношение Борна (1) можно обобщить на случай кристаллов средних и низших сингоний по аналогии с [17], где строго показано, что отклонения от соотношений Коши образуют симметричный тензор второго ранга.

Автор признателен Л.И. Анатичуку и О.Я. Лусте за полезные дискуссии.

## Список литературы

- [1] M. Born. Ann. Physik, Lpzg. **44**, 8, 605 (1914).
- [2] S. Bhagavantam, J. Bhimuassenachar. Proc. Roy. Soc. London **A187**, 381 (1946).
- [3] M. Born. Intern. Conf. Lattice dynamics at Copenhagen (1964).
- [4] R.F.S. Hearmon. Rev. Modern. Phys. **18**, 4, 409 (1946).
- [5] E. Prince, W.A. Wooster. Acta-Cryst. **6**, 450, 1717 (1953).
- [6] H.J. McSkimin, W.L. Bond. Phys. Rev. **105**, 1, 116 (1957).
- [7] E.W.J. Mitchell. In: Physical properties of diamond. Oxford, clarendon Press (1965). 373 p.
- [8] H.J. McSkimin, P. Andreatch, P. Geyrn. J. Appl. Phys. **43**, 3, 985 (1972).
- [9] Физические свойства алмаза / Под ред. акад. АН УССР Н.В. Новикова. Наук. думка, Киев (1987). 192 с.
- [10] H.V. Huntington. In: Solid State Physics / Ed. by F. Seitz, D. Turnbull. Acad. Press., N. Y. (1958). Vol. 7. P. 214.
- [11] С.П. Никаноров, Б.К. Кардашев. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. Наука, М. (1985). 253 с.
- [12] P.N. Keating. Phys. Rev. **145**, 4, 637 (1966).
- [13] R.M. Martin. Phys. Rev. B **1**, 1, 1005 (1970).
- [14] W. Ludwig. Recent developments in the lattice theory. Springer Tracts in Modern Physics / Ed. by H. Höheler. Berlin (1967). Vol. 43. P. 1.
- [15] С.И. Новикова. Тепловое расширение твердых тел. Наука, М. (1974). С. 292.
- [16] В.П. Михальченко. ЖФХ **LIII**, 2, 476 (1979).
- [17] S. Haussuhl. Phys. Kondens. Materie **6**, 3, 181 (1967).
- [18] В.М. Надутов. В кн.: Энциклопедический словарь „Физика твердого тела“. (1998). Т. 2. С. 483.
- [19] В.К. Григорович. Металлическая связь и структура металлов. Наука, М. (1988). 295 с.