К ТЕОРИИ МИКРОВОЛНОВОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

В. Мицкевич

Теория поглощения микроволнового излучения в ионных кристаллах доводится до вида, позволяющего сопоставление ее с опытными данными. При рассмотрении ангармонизма колебаний решетки как причины поглощения учитывается не только затухание моды колебания, взаимодействующего с внешним полем излучения, но и конечность времени жизни коротковолновых фононов. Проводится сравнение результатов теоретических расчетов с данными экспериментальных исследований поглощения в пяти щелочно-галоидных кристаллах на длинах волн 0.5, 0.9 и 2.6 мм при комнатной температуре.

В предлагаемой статье рассматривается теория длинноволнового ИК поглощения на частотах, существенно меньших фундаментальной частоты ω_{0t} кристалла, принимая во внимание ангармонизм колебаний решетки. Эта проблема уже обсуждалась в [1, 2] и других работах. Цель этой статьи состоит в последовательном рассмотрении влияния ангармонического потенциала 3-го и 4-го порядков на поглощение в кристалле с учетом конечности времени жизни коротковолновых фононов, представлении теории в законченном виде и доведении ее вплоть до численных результатов, имея в виду возможность экспериментальной оценки параметров ангармоничности.

Для объяснения поглощения излучения исчезающе малой частоты с помощью двухфононного процесса (кубический ангармонизм) необходимо учесть вырождение колебательных мод решетки. Симметрийное вырождение по крайней мере для центро-симметричных кристаллов, по-видимому, не может объяснить поглощения; случайное же возможно при перекрывании оптических и акустических ветвей колебаний. Поэтому в качестве испытуемых объектов взяты сравнительно полно исследованные щелочно-галоидные кристаллы с близкими по массе ионами ($NaCl$ и KCl), у которых есть это перекрывание, кристалл LiF с большим отношением статической и высокочастотной проницаемостей $\varepsilon_0/\varepsilon_\infty$ и отсюда со значительным разделением продольных и поперечных ветвей колебаний, а также кристаллы с заметно различающимися массами ионов (NaI и KBr), чьи оптические ветви отделены от акустических частотной щелью.

1. Постоянные затухания и полуширины фононных линий

Диэлектрическая проницаемость кристалла с учетом только нижней предельной частоты может быть записана (см., например, [1]) в виде

$$\varepsilon_{xy}(\omega) = \varepsilon_\infty^{xy} + \frac{\omega_{0t}^2\left(\varepsilon_0^{xy} - \varepsilon_\infty^{xy}\right)}{\omega_{0t}^2 - \omega^2 - 2i\omega\Gamma_{0t}(\omega)}, \tag{1}$$

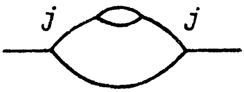

Рис. 1. График второго по ангармоничности порядка члена, дающего расходящийся вклад в Γ_{0t}.

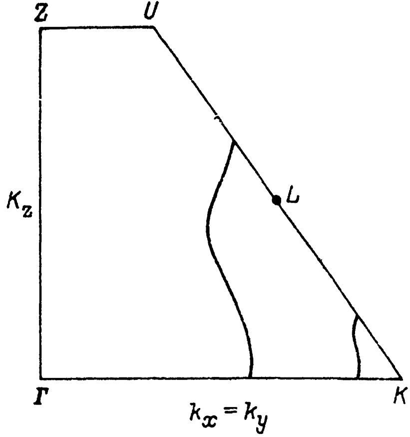

Рис. 2. Кривые случайного вырождения в плоскости $k_x = k_y$ кристалла NaCl.

где Γ_{0t} — постоянная затухания предельной моды $0t$ является частным случаем постоянной затухания моды $\mathbf{k}j$

$$\Gamma^{(3)}_{\mathbf{k}j}(\omega) = \frac{\pi\hbar}{16\omega N} \sum_{12} \frac{|\Phi \mathbf{k}j, \mathbf{k}_1 j_1, \mathbf{k}_2 j_2)|^2}{\omega_{j_1}\omega_{j_2}} (n_{j_1} + n_{j_2} + 1)\, \delta(\omega - \omega_{j_1} - \omega_{j_2}). \quad (2)$$

Здесь и далее знак $\sum_{12}$ означает суммирование по $\mathbf{k}_1 j_1$, $\mathbf{k}_2 j_2$ и ради сокращения записи у средних чисел заполнения n_j и частот оставлены только индексы j_1 и j_2, которые наряду с положительными пробегают и отрицательные значения, причем $\omega_{-j} = -\omega_j$, $n_{-j} = -n_j - 1$.

Так как, на исчезающе малых частотах постоянная Γ_{0t}, рассчитанная в первом по ангармоничности приближении, оказывается неудовлетворительной, то надо рассмотреть вклады второго приближения. Это было сделано в [1], однако, как указал Таганцев [2], вклад от графика (рис. 1) содержит расходящиеся члены. Для устранения расходимости достаточно заменить однофононный пропагатор линии j—j на перенормированный пропагатор, учитывающий конечность времени фонона $\mathbf{k}_j$. Чтобы последовательно учесть ангармонизм 3-го и 4-го порядков, добавляем к кубическому вкладу на линии j—j (рис. 1) вклады второго приближения. Затем с помощью стандартной техники расчета графиков получаем основной вклад в постоянную затухания от наиболее «опасных» членов

$$\Gamma'_{0t}(\omega) = \frac{\hbar}{8\omega N} \sum_{\mathbf{k}_1 j_1} {\sum_{j}}' \frac{|\Phi(0t, \mathbf{k}_1 j_1, -\mathbf{k}_1 j)|^2}{\omega_{j_1}\omega_j^2} (n(\omega_{j_1} - \omega) - n_{j_1}) \times \\ \times \frac{(\omega_{j_1} - \omega)\, \Gamma_{\mathbf{k}_1 j}(\omega_{j_1} - \omega)}{(\omega - \omega_{j_1} + \omega_j)^2 + \Gamma_{\mathbf{k}_1 j}(\omega_{j_1} - \omega)^2}, \quad (3)$$

где штрих у знака суммы по j означает, что индексы j_1 и j должны быть одного знака, аргумент числа заполнения указывает значение частоты фонона, постоянная $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ представляет собой сумму $\Gamma^{(3)}_{\mathbf{k}j}$ и квартичной постоянной (ср. [1])

$$\Gamma^{(4)}_{\mathbf{k}j}(\omega) = \frac{\pi\hbar^2}{96\omega N^2}\sum_{123}\left|\Phi\ (\mathbf{k}j, \mathbf{k}_1j_1, \mathbf{k}_2j_2, \mathbf{k}_3j_3) - \sum_{j'}\ (f^{j'}_{123} + f^{j'}_{231} + f^{j'}_{312})\right|^2 \times$$
$$\times \frac{(n_{j_1}+1)(n_{j_2}+1)(n_{j_3}+1) - n_{j_1}n_{j_2}n_{j_3}}{\omega_{j_1}\omega_{j_2}\omega_{j_3}}\,\delta\,(\omega - \omega_{j_1} - \omega_{j_2} - \omega_{j_3}), \tag{4}$$

причем

$$J^{j'}_{123} = \frac{\Phi\ (\mathbf{k}j, \mathbf{k}_1j_1, \mathbf{k}'j')\ \Phi\ (-\mathbf{k}'j', \mathbf{k}_2j_2, \mathbf{k}_3j_3)}{2\omega_j(\omega - \omega_{j_1} - \omega_{j'})}. \tag{5}$$

Может казаться алогичным одновременный учет членов разного порядка, однако, хотя $\Gamma^{(4)}$ вообще заметно меньше, чем $\Gamma^{(3)}$, в окрестности частоты ω_{0t}, как показывают эти расчеты, они сравнимы, что объясняется менее жесткими требованиями правил отбора, предъявляемыми к $\Gamma^{(4)}$ [3]. Остающийся вклад графика на рис. 1 вместе с вкладами других графиков того же порядка не имеет расходимостей и записывается в виде

$$\Gamma''_{0t}(\omega) = \Gamma^{(4)}_{0t}(\omega) - \Gamma'_{0t}(\omega). \tag{6}$$

Роль полуширины фононной линии $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ (т. е. постоянной затухания на частоте фонона) в (3) важна, лишь если мала величина $\omega - \omega_{j1} + \omega_j$. Поэтому при достаточно высокой температуре, выражаемой в энергетических единицах, когда можно заменить n_j на $T/\hbar\omega_j$ (низкотемпературный случай требует отдельного рассмотрения), переходя в (3) от суммы к интегрированию по безразмерному вектору $\mathbf{k} = (a/\pi)\ \mathbf{k}_1$, получаем

$$\Gamma'_{0t}(\omega) = \frac{T}{8n}\sum_{j_1j}{}'\ \overline{A}_{tj_1j}\int\frac{\Gamma_{\mathbf{k}j}(\omega)\,d^3k}{(\omega - \omega_{j_1} + \omega_j)^2 + \Gamma_{kj}(\omega_j)^2}, \tag{7}$$

где $\overline{A}_{tj_1j}$ представляет собой некоторым образом усредненную по зоне Бриллюэна величину $\left|\Phi\ (\mathbf{k}'j', \mathbf{k}_1j_1, \mathbf{k}_2j)\right|^2\omega^2_{0t}\,\omega^{-2}_{j'}\omega^{-2}_{j_1}\omega^{-2}_j$ при $\mathbf{k}' = 0$ и $j' = t$, $n = 8a^3/v_0$; $2a$ — постоянная решетки; v_0 — объем элементарной ячейки кристалла.

Дальнейший расчет Γ'_{0t} зависит от характера вырождения частот ω_{j_1} и ω_j. Херринг [4] показал, что это вырождение может быть обусловлено свойствами симметрии кристалла или быть случайным. В обоих случаях вырождение возможно либо в изолированных точках (о них речь ниже), либо вдоль некоторых линий зоны. В качестве примера случайного вырождения на рис. 2 показаны кривые пересечения продольной акустической и поперечной оптической ветвей в плоскости $k_x = k_y$ для кристалла NaCl.

Введем «цилиндрические» координаты z, r и φ, где ось z направлена вдоль линии вырождения, и, считая ее линией пересечения, обозначим $\omega_{j_1} - \omega_j = b_{j_1j}\,r$. В предположении, что $\Gamma\mathbf{k}_j$ и $b = |\ b_{j_1j}|$ являются приблизительно постоянными величинами, интегрирование в (7) дает

$$\Gamma'_{0t}(\omega) = \frac{\pi T}{2nb^2} L \sum_j \overline{A}_{tj_1j} \left(\Gamma_j \ln \frac{bR}{\sqrt{\omega^2 + \Gamma_j^2}} + \omega \operatorname{arctg} \frac{\omega}{\Gamma_j} \right), \tag{8}$$

где L — полная длина линий вырождения, R — верхний предел интегрирования по r, индекс $j > 0$ различает пересекающиеся ветви. Аналогичный по существу результат был получен Таганцевым [2].

Если ветви колебаний не пересекаются, а сближаются в некоторой точке $\mathbf{k}_i$ на минимальное расстояние $\overline{\omega}_i$, то в окрестности этой точки обычно можно принять, что

$$\omega_j - \omega_{j_1} = \overline{\omega}_i + \sum_x a_{ix}^2 (k_x - k_{ix})^2.$$

Подставляя это равенство в (7), после интегрирования получаем для не слишком большой частоты ($a_i^3 = a_{ix}a_{iy}a_{iz}$, $\Gamma_i = \Gamma_{j_1} + \Gamma_j$)

$$\Gamma'_{0t}(\omega) = \frac{\pi T}{4n} \sum_i \frac{A_{tj_1j}\Gamma_i}{a_i^3} \sum_{\pm} \left(\frac{1}{\sqrt{\overline{\omega}_i \pm \omega}} \operatorname{arctg} \frac{pa_i}{\sqrt{\omega_i \pm \omega}} - \frac{pa_i}{p^2a_i^2 + \overline{\omega}_i \pm \omega} \right), \quad \omega < \overline{\omega}_i + \Gamma_i, \tag{9}$$

где $p = \max | \mathbf{k}_j - \mathbf{k} |$, т. е. максимально допустимое (из-за соприкосновения сходных областей) удаление от точки $\mathbf{k}_i$, а при бо́льших частотах

$$\Gamma'_{0t}(\omega) = \frac{\pi^2 T}{4n} \sum_i A_{tj_1j} (\omega - \overline{\omega}_i)^{1/2} / a_i^3, \quad \omega > \overline{\omega}_i + \Gamma_i. \tag{10}$$

Обратимся к вкладу (6) в затухание. Ввиду жестких требований правил отбора, накладываемых на члены кубического ангармонизма, величина постоянной Γ''_{0t} обусловлена в основном квартичным ангармонизмом. Заменяя n_j на $T/\hbar\omega_j$, получаем после перехода к интегрированию

$$\Gamma''_{0t}(\omega) = \frac{\pi T^2}{96n^2} \sum_{j_1j_2j_3} \overline{B}_{tj_1j_2j_3} \int\int d^3k_1 d^3k_2 \delta(\omega - \omega_{j_1} - \omega_{j_2} - \omega_{j_3}), \tag{11}$$

где $\overline{B}_{tj_1j_2j_3}$ представляет собой усредненную по пространствам векторов $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ величину $\left|\Phi(0t, \mathbf{k}_1j_1, \mathbf{k}_2j_2, \mathbf{k}_3j_3)\right|^2 \omega_{j_1}^{-2}\omega_{j_2}^{-2}\omega_{j_3}^{-2}$.

Естественно, наибольший вклад в Γ''_{0t} дают низколежащие ветви. В [5] установлено, что из-за фазовых соотношений между векторами поляризации в оптимальном случае лишь две ветви являются акустическими, а третья — оптическая. Приняв это и использовав упрощенную аппроксимацию соответствующей трехфононной поверхности

$$\omega_{j_1} + \omega_{j_2} + \omega_{j_3} \equiv \pm c_1 (k_1 + k_2) \mp \omega_{0t} = \omega, \tag{12}$$

проинтегрируем (11) по зоне, представив ее сферой радиуса k_0. В результате, опуская члены порядка ω^2/ω_{0t}^2, и с учетом тождественности фононов ($\gamma_0 = \omega_{0t}/(C_{1k0})$)

$$\Gamma_{0t}''(\omega)=\frac{2\pi^3T^2}{5n^2c_1}k_0^5\overline{B}\chi(\gamma_0),\quad \chi(\gamma)=1-\frac{5}{2}\gamma+\frac{5}{3}\gamma^2-\frac{1}{15}\gamma^5. \tag{13}$$

Выражения (2) и (4), определяющие полуширины фононных линий Γ_j, входящие в формулы (8) и (9), могут быть конкретизированы, если ограничиться учетом акустических и нижних оптических колебанильных ветвей. Так, полуширина линии поперечного оптического фонона $\hbar\omega_{\mathbf{k}t}$ при учете кубического ангармонизма обязана главным образом присоединением поперечного $\hbar\omega_{\mathbf{k}at}$ (или продольного $\hbar\omega_{\mathbf{k}al}$) акустического фонона и испусканием продольного оптического $\hbar\omega_{\mathbf{k}l}$. Воспользовавшись аппроксимацией (ω_{0l} — предельная частота продольных оптических колебаний)

$$\omega_{\mathbf{k}_1l}-\omega_{\mathbf{k}_2at}=\omega_{0l}-c_2k_2\,, \tag{14}$$

получаем из (2)

$$\Gamma_{\mathbf{k}t}^{(3)}(\omega_{\mathbf{k}t})=\frac{\pi^2T}{2nc_2^3}\overline{A}_{tal}\omega_{kt}^2(\omega_{0l}-\omega_{\mathbf{k}t})^2. \tag{15}$$

С учетом квартичного ангармонизма полуширина обусловлена присоединением поперечного акустического и испусканием поперечных оптического и акустического фононов. Используя аппроксимацию (12), из (4) после интегрирования следует $\gamma_1=(\omega_{0t})-\omega_{\mathbf{k}t}/(c_1k_0)$

$$\Gamma_{\mathbf{k}t}^{(4)}(\omega_{\mathbf{k}t})=\frac{\pi^3T^2}{20n^2c_1}k_0^5\overline{B}_{tata}\omega_{\mathbf{k}t}^2\chi(\gamma_1). \tag{16}$$

Полуширина линии акустического (поперечного или продольного) фонона $\hbar\omega_{\mathbf{k}a}$ обязана присоединению и испусканию акустических же фононов (кубический ангармонизм), и, приняв аппроксимацию

$$\omega_{\mathbf{k}a}+\omega_{\mathbf{k}_1a'}-\omega_{\mathbf{k}_2a''}=2\omega_{\mathbf{k}a}-2c_3k_2\,, \tag{17}$$

получаем

$$\Gamma_{\mathbf{k}a}^{(3)}(\omega_{\mathbf{k}a})=\frac{\pi^2T}{2nc_3^3}\overline{A}_{aa'a''}\omega_{\mathbf{k}a}^4\,, \tag{18}$$

тогда как при присоединении оптического поперечного и испускании такого же акустического фононов, допустив, что (4)

$$\omega_{j_1}+\omega_{j_2}+\omega_{j_3}=c_4k_3\,, \tag{19}$$

находим

$$\Gamma_{\mathbf{k}a}^{(4)}(\omega_{\mathbf{k}a})=\frac{\pi^3T^2}{12n^2c_4^3}k_0^3\overline{B}_{atta}\omega_{\mathbf{k}a}^4\,. \tag{20}$$

Аппроксимации и формулы (14)—(20), оправданные при малых волновых векторах, дают, по-видимому, разумную оценку полуширин и при их предельных значениях.

2. Численные результаты для щелочно-галоидных кристаллов и их обсуждение

Как показано в [5], при направлении k [111] в некотором приближении

$$A_{tjj'} \equiv |\Phi(0t, \mathbf{k}j, -\mathbf{k}j')|^2 \omega_j^{-2}\omega_{j'}^{-2} = 4\alpha^2/(3\mu^3\omega_{0t}^2\omega_{0l}^2), \tag{21}$$

где j, j означают продольную акустическую и поперечную оптическую ветви; μ — приведенная масса ионов; параметр кубического ангармонизма, определяемый третьими производными относительно короткодействующего и кулоновского потенциалов $\alpha = U''' + 6q^2/a^4$, может быть выражен через экспериментально определяемую величину $s_3 = (V/\Delta\varepsilon)\ (\partial\Delta\varepsilon/\partial V)$, поскольку в приближении жесткого иона

$$\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_\infty = 2\pi q^2/(\mu a^3\omega_{0t}^3),$$

$$\mu\omega_{0t}^2 = 2u'' + 4u'/a - 2\pi q^2/(3a^3). \tag{22}$$

Так как выражения, аналогичные (21), оказываются удовлетворительными и в симметричных направлениях k [110] и [111], то, учитывая их приблизительное постоянство при фиксированном направлении [5], возможно усреднение величины A по этим направлениям. Так, усредняя $A_{tjj'}$ из (7) по направлениям [111] и [110], с помощью (22) получаем, округляя численные коэффициенты, следующее выражение:

$$\overline{A}_{tjj'} = \frac{1}{7}\left(3\,\frac{s_3 + 2}{a\omega_{0l}\sqrt{\mu}}\right)^2. \tag{23}$$

Подобное усреднение распространяется и на величины A в (15) и (18), но в последней формуле, используя выражение (23), надо заменить ω_{0l} на ω_{0t} 1/7 на 1/5. Параметры же A_l в (9) и (10) относятся к заданным направлениям.

Для квартичного ангармонизма, когда векторы $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ направлены по [111],

$$B_{tj_1j_2j_3} \equiv |\Phi(0t, \mathbf{k}_1j_1, \mathbf{k}_2j_2, \mathbf{k}_3j_3)|^2 \omega_{j_1}^{-2}\omega_{j_2}^{-2}\omega_{j_3}^{-2} = 4\beta^2/(9\mu^4\omega_{0t}^6), \tag{24}$$

где j_1, j_2 относятся к акустическим, а j_3 — к оптической поперечным ветвям [5]; параметр квартичного ангармонизма $\beta = U^{\mathrm{IV}} - 24q^2/a^5$. С помощью (22) он может быть выражен через s_3 и $s_4 = (V^2/\Delta\varepsilon)\ (\partial^2\Delta\varepsilon/\partial V^2)$. Усредняя B по направлениям векторов $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, находим

$$\overline{B}_{aat} = \frac{1}{4}\left(9\,\frac{s_4 - 2\,(s_3^2 + s_3 + 1)}{a^2\omega_{0l}^2\mu}\right)^2. \tag{25}$$

Доминирование в Γ″ вклада квартичного ангармонизма (см. (11) и далее) объясняется сравнительной малостью величины $\overline{A}^2$, появляющейся в (4) и характеризующей вклад кубического ангармонизма во втором приближении: после усреднения по направлениям $\overline{A^2} \lesssim (1/5)\overline{A}^2$.

Численные расчеты опирались на опытные значения величин μ, ω_{0t}, a, ε_0 и ε_∞, заимствованные из литературных источников (s_3 и s_4 были взяты из [6, 7]), и на результаты теоретических исследований колебательных спектров кристаллов NaCl [8], KCl [9], KBr [10], NaI [11] и LiF [12]. По фононным спектрам была оценена длина L, равная $24l$, где l — длина линии вырождения в одной из трех плоскостей симметрии октанта зоны (рис. 2). Область изменения волновых векторов ограничивалась сферой радиуса $k_0 = \sqrt{3}/2$, проходящей через точку L, ибо если в пределах сферы величины A и B слабо зависят от значений волновых векторов, то при выходе за этот предел они быстро уменьшаются. В качестве

Таблица 1

Параметры теории

	L	R	c	$\bar{\omega}$	a_l^2
			$\cdot 10^{-13}$ с		
LiF	18	0.35	8.5	—	—
NaCl	17	0.25	3.4	—	—
NaI	—	—	1.6	0.7	2.5
KCl	16	0.25	3.2	0.11	6.5
KBr	—	—	1.9	0.20	3.0

R было взято расстояние от точки пересечения линии вырождения с осью третьего порядка до точки L. В табл. 1 приведены безразмерные длины L и R вместе с усредненными по спектрам параметрами $\bar{\omega}$, a_l и c (коэффициенты c_l в вышеприведенных аппроксимациях сравнительно близки). Для рассматриваемых кристаллов a есть расстояние между ближайшими соседями, $n = 4$, $p = 1/5$, а точками наибольшего сближения ветвей являются точки L и точки на осях 2-го порядка. Формулы (9) и (10) учитывались для кристаллов KCl, KBr и NaI. Параметр в (8), оцененный по фононным кривым в направлениях [111] и [110], оказался близким к ω_{0t}.

Полуширины фононных линий, рассчитанные по формулам (15), (16), (18) и (20) в двух точках зоны, а также величины постоянных затухания при $\omega = 0$ представлены в табл. 2. Хотя упомянутые формулы корректны, строго говоря, лишь при малых значениях волновых векторов, полученные результаты неплохо согласуются с учетом различия параметров ангармонизма с данными [13] для KBr и NaI (для последнего кристалла использованы значения $s_3 = 5$ и $s_4 = 30$). Величины полуширин линий предельных поперечных оптических фононов (в точке Г) близки к опытным данным работы [14], однако температурная зависимость полуширин, измеренная в этой работе, не соответствует вкладам ангармонизма 3-го и 4-го порядков, приведенных в табл. 2.

Опираясь на данные табл. 1, 2, мы рассчитали значения мнимой части проницаемости ε'' на трех длинах волн, помещенные вместе с

Таблица 2

Полуширины фононных линий в точках Γ и L и постоянные затухания (в 10^{11} c^{-1})

	$\Gamma_{0t}^{(3)}(\omega_{0t})$	$\Gamma_{0t}^{(4)}(\omega_{0t})$	$\Gamma_{Lt}^{(3)}(\omega_{Lt})$	$\Gamma_{Lt}^{(4)}(\omega_{Lt})$	$\Gamma_{Lat}^{(3)}(\omega_{Lat})$	$\Gamma_{Lat}^{(4)}(\omega_{Lat})$	$\Gamma_{0t}'(0)$	$\Gamma_{0t}''(0)$
LiF	9.0	10	8.5	10	7.0	4.5	16	1.2
NaCl	3.7	2.7	4.5	1.5	4.0	2.0	7.6	0.5
NaI	9.3	3.2	9.5	3.0	3.0	2.0	0.4	2.4
KCl	3.1	1.3	4.0	0.5	2.5	2.0	8.9	0.6
KBr	2.9	2.3	3.0	1.5	2.0	1.0	0.8	1.8

Таблица 3

Рассчитанная мнимая диэлектрическая проницаемость кристаллов ε'', 10^{-3} вместе с опытными данными при $T = 300$ К

	λ, мм				λ, мм		
	2.6	0.9	0.5		2.6	0.9	0.5
LiF	5.5 7 [15]	22 19 [16]	57 37 [16]	NaI	3.6 —	11 14 [18]	22 28 [18]
NaCl	5.2 10 [15]	30 34 [17]	88 116 [18]	KCl	3.2 5 [17]	16 22 [18]	49 37 [18]
				KBr	2.3 5 [15]	11 10 [18]	34 61 [18]

опытными данными в табл. 3. Отмечая удовлетворительное согласие теоретических результатов с опытом, несколько заниженные значения первых при $\lambda = 2.6$ мм можно объяснить как недостаточной надежностью экспериментальных данных [15], так и определенным произволом в выборе значений параметров теории. Учет же вкладов в ε'' от не принятых во внимание более отделенных друг от друга колебательных ветвей не должен заметно изменить полученные результаты. При $\omega \to 0$ $\varepsilon'' \sim T^2$, но уже при $\omega > \Gamma'_{0t}$ температурный коэффициент ε'' для NaCl становится близким к единице в согласии с опытом [18], что говорит о доминировании кубического в первом приближении ангармонизма вклада в поглощение. То же самое теория предсказывает для KCl и LiF, хотя эксперимент показывает несколько иную зависимость $\varepsilon''(T)$ для LiF [18]. У кристалла с частотной щелью KBr линейный по T вклад в ε'' в согласии с (10) появляется только при $\lambda < 0.9$ мм, т. е. при $\omega > \bar{\omega}$, но для NaI (здесь $\omega < \bar{\omega}$) этот вклад остается квадратичным, что подтверждается опытными данными [18].

В статье Гуревича и Таганцева [19] теоретико-групповыми методами рассматривается высокотемпературное поглощение в кристаллах различной симметрии. Вышеприведенные результаты расчетов находятся в полном согласии с выводами этой статьи.

Остается остановиться на вкладе в затухание от точек вырождения. Хотя в [1] указывается, что роль изолированных точек мала, в работе [19] показано, что вклад некоторых точек на линиях вырождения может быть значительным. Однако это никак не затрагивает кристаллы рассмотренного типа. Что же касается роли симметрийного вырождения в поглощении в кристаллах типа NaCl, то, согласно [5], она пренебрежима вследствие чрезвычайной малости вероятности комбинирования вырожденных поперечных фононов.

Список литературы

[1] Вакс В. Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 327 с.
[2] Таганцев А. К. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 3. С. 1087—1098.
[3] Гуревич Л. Э., Ипатова И. П. // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 2. С. 231—236.
[4] Herring C. // Phys. Rev. 1937. V. 52. N 1. P. 161—165.
[5] Мицкевич В. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 4. С. 1238—1242.
[6] Fontanella J., Andeen C., Schuele D. // Phys. Rev. 1972. V. B6. N 2. P. 582—590.
[7] Robinson M. C., Hallis Hallat A. C. // Canad. J. Phys. 1966. V. 44. N 10. P. 2211—2230.
[8] Толпыго К. Б., Заславская И. Г. // УФЖ. 1956. Т. 1. № 3. С. 226—232.
[9] Демиденко А. А., Демиденко З. А., Толпыго К. Б. // УФЖ. 1958. Т. 3. № 6. С. 728—742.
[10] Кучер Т. И. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. № 3. С. 498—505.
[11] Демиденко З. А., Толпыго К. Б. // ФТТ. 1961. Т. 3. № 11. С. 3435—3444.
[12] Демиденко З. А. // ФТТ. 1962. Т. 4. № 7. С. 1874—1877.

[13] Cowley E. R., Cowley R. A. // Proc. Roy. Soc. A. 1965. V. 287. N 1409. P. 259—290.
[14] Lowndes R. P., Rastogi A. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 8. P. 3598—3620.
[15] Ovvens J. C. // Phys. Rev. 1969. V. 181. N 3. P. 1228—1236.
[16] Seger G., Genzel L. // Z. Phys. 1962. V. 169. N 1. P. 66—71.
[17] Genzel L., Happ H., Weber R. // Z. Phys. 1959. V. 154. N 1. P. 13—18.
[18] Stolen R., Dransfeld K. // Phys. Rev. 1965. V. 139. N 4A. P. 1295—1303.
[19] Гуревич В. Л., Таганцев А. К. // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. № 4. С. 1335—1345.

Вильнюсский университет

Поступило в Редакцию
8 сентября 1988 г.
В окончательной редакции
31 октября 1991 г.