

Влияние давления на упругие свойства карбида кремния

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: sergei.davydov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 13 ноября 2003 г.)

В рамках модели Китинга рассчитаны зависимости от давления p упругих постоянных второго порядка C_{ij} и скорости звука в кристаллах 3C-SiC и 2H-SiC. Из зависимости C_{ij} от p получены упругие постоянные третьего порядка C_{ijk} для 3C-SiC.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ-03-02-16054, INTAS-01-0603 и NATO SfP N 978011.

В связи с широким использованием структур на основе карбида кремния упругие свойства различных полиморфов SiC вызывают большой интерес. Если внешнее гидростатическое давление p отсутствует, упругие модули второго порядка C_{ij} и скорости звука $v_i(\mathbf{q}) = \sqrt{C_i(\mathbf{q})/\rho}$ ($C_i(\mathbf{q})$ — определенная комбинация C_{ij} , соответствующая распространению в направлении \mathbf{q} звуковой волны с поляризацией n_i ; ρ — плотность кристалла) могут быть рассчитаны в гармоническом приближении, тогда как при $p \neq 0$ необходимо учитывать ангармонизм [1,2], что позволяет уточнить потенциал межатомного взаимодействия.

В работе [3] методом функционала плотности рассчитаны значения C_{ij} , dC_{ij}/dp и $v_i(\mathbf{q})$ для кубической модификации карбида кремния. В настоящей работе мы проанализируем результаты этих расчетов, воспользовавшись моделью силовых констант Китинга [4], хорошо зарекомендовавшей себя при описании упругих свойств кристаллов $A_N B_{8-N}$ [5].

1. 3C-SiC: зависимость упругих постоянных второго порядка от давления.

Модель Китинга для тетраэдрических кристаллов содержит две силовые константы: α , описывающую центральное взаимодействие ближайших соседей, т.е. реакцию на изменение длины связи, и β , отвечающую нецентральному взаимодействию вторых соседей, т.е. отклику тетраэдра на изменение угла между $|sp^3$ -орбиталями. Упругие постоянные второго порядка при этом имеют вид

$$C_{11} = \frac{\alpha + 3\beta}{4a_0}, \quad C_{12} = \frac{\alpha - \beta}{4a_0}, \quad C_{44} = \frac{\alpha\beta}{a_0(\alpha + \beta)}, \quad (1)$$

где $4a_0$ — постоянная решетки недеформированного кристалла. При этом выполняется тождество

$$R \equiv \frac{C_{44}(C_{11} + C_{12})}{C_S(C_{11} + 3C_{12})} = 1, \quad (2)$$

где модуль сдвига $C_S = (1/2)(C_{11} - C_{12})$. Отметим, что соотношения (1) и (2) получены для чисто ковалентных кристаллов IV группы (гомополярная связь). Карбид кремния относится к кристаллам с гетерополярной

связью и, строго говоря, описывается моделью Мартина [6], распространившего модель Китинга на ионно-ковалентные кристаллы. При этом в теории появляются эффективные заряды ионов и соответствующие кулоновские вклады в упругие постоянные. Кроме того, вместо одной нецентральной константы β появляются две (β_1 и β_2), описывающие реакцию на изменение тетраэдрических углов между $|sp^3$ -орбиталями, центрированными на атомах Si и C. Можно, однако, показать, что ионность связи Si-C мала, что позволяет с хорошей точностью пренебречь кулоновскими вкладами. Действительно, в рамках метода связывающих орбиталей Харрисона [7] ковалентность связи кремний-углерод $\alpha_c = 0.97$ (см., например, [8]), что соответствует ионности $f_i = 1 - \alpha_c^3 \approx 0.09$ по Филлипсу [9]. Положив далее $\beta = (1/2)(\beta_1 + \beta_2)$, придем к модели Китинга.

Подставляя найденные в [3] значения упругих модулей ($C_{11} = 385$, $C_{12} = 135$, $C_{44} = 257$ GPa) в выражение (2), получим $R \approx 1.35$, что уже вызывает некоторые сомнения в справедливости экспериментальных данных, так как для кристаллов алмаза и кремния соотношение (2) выполняется с точностью до 1% [4]. Сравнение данных работы [3] с приведенными в [5] экспериментальными значениями упругих постоянных C-SiC ($C_{11} = 410.5$, $C_{12} = 164$, $C_{44} = 194$ GPa), для которых соотношение (2) выполняется с очень высокой точностью, показывает увеличивающееся расхождение в ряду $C_{11} \rightarrow C_{12} \rightarrow C_{44}$: отношения C_{ij} (из [3])/ C_{ij} (из [5]) равны соответственно 0.94, 0.82 и 1.32. Следует, однако, отметить, что в отличие от C_{44} , значения второго модуля сдвига $C_S = (1/2)(C_{11} - C_{12})$, определяемого только константой β , почти совпадают: $C_S = 125$ [3] и 123 GPa [5]. Неплохо согласуются и объемные модули сжатия $B = (1/3)(C_{11} + 2C_{12})$: $B = 218$ [3] и 246 GPa [5]. В наших дальнейших расчетах будем исходить из экспериментальных данных [5], что дает $\alpha = 98$ N/m и $\beta = 27$ N/m. В модели Китинга параметр Клейнмана $\xi = (\alpha - \beta)/(\alpha + \beta) \approx 0.57$, что превышает полученное в [5] значение $\xi = 0.41$. Предположим (как это делалось нами при расчете упругих свойств полуметаллов V группы [10]), что под действием давления силовые константы изменяются ($\alpha \rightarrow \tilde{\alpha} = \alpha + ap$, $\beta \rightarrow \tilde{\beta} = \beta + bp$, где a и b — константы размерности длины). Тогда упругие

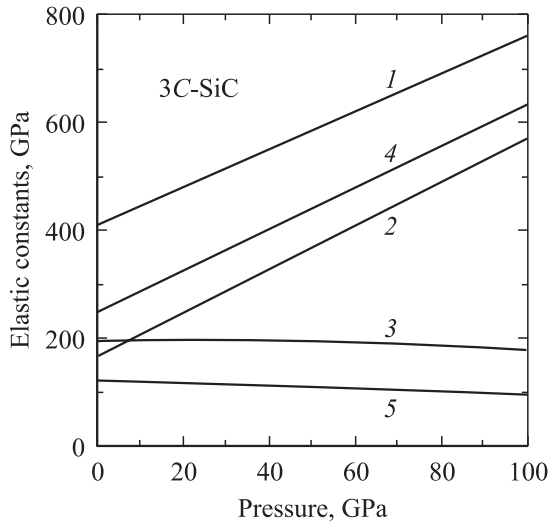


Рис. 1. Зависимость упругих постоянных кристалла 3C-SiC от давления. 1 — \tilde{C}_{11} , 2 — \tilde{C}_{12} , 3 — \tilde{C}_{44} , 4 — B , 5 — \tilde{C}_s .

постоянные могут быть представлены в виде

$$\tilde{C}_{11} = C_{11} + \frac{a + 3b}{4a_0} p, \quad \tilde{C}_{12} = C_{12} + \frac{a - b}{4a_0} p,$$

$$\tilde{C}_{44} = \frac{\alpha\beta + (\alpha b + a\beta)p + abp^2}{(\alpha + \beta) + (a + b)p}. \quad (3)$$

Здесь и далее все величины, зависящие от давления, будем помечать тильдой. Для нахождения констант a и b воспользуемся результатами работы [3], где получены следующие значения $d\tilde{C}_{ij}/dp$: $d\tilde{C}_{11}/dp = 3.49$ и $d\tilde{C}_{12}/dp = 4.06$.¹ Отсюда имеем $a = 17.08 \text{ \AA}$ и $b = -0.62 \text{ \AA}$. Отметим, что константу b мы определяли по значению $d\tilde{C}_s/dp$.

Результаты расчета зависимости \tilde{C}_{ij} от p представлены на рис. 1. Сравнение с соответствующими зависимостями работы [3] показывает, что существенно различаются только кривые $\tilde{C}_{44}(p)$; если в [3] имеет место монотонное, хотя и слабое увеличение модуля сдвига \tilde{C}_{44} с давлением, то в нашем случае $\tilde{C}_{44}(p)$ сначала возрастает от $\tilde{C}_{44}(0) = 194 \text{ GPa}$ до максимального значения 198 GPa при $p_m = 21.5 \text{ GPa}$, а затем плавно уменьшается до 178 GPa при $p = 100 \text{ GPa}$. Значение p_m можно найти из условия $d\tilde{C}_{44}/dp = 0$, которое приводит к уравнению

$$p^2 + 2 \frac{\alpha + \beta}{a + b} p + \frac{a\beta^2 + b\alpha^2}{ab(a + b)} = 0. \quad (4)$$

2. 3C-SiC: зависимость скорости звука от давления.

Для расчета скорости звука $v_i(\mathbf{q}) = \sqrt{C_i(\mathbf{q})/\rho}$ необходимо вычислить соответствующие комбинации \tilde{C}_{ij} ,

¹ К сожалению экспериментальные зависимости упругих постоянных второго порядка от давления для карбида кремния нам неизвестны.

определяющие $C_i(\mathbf{q})$. Они имеют следующий вид (см., например, [3]):

$$C_{[111]}([111]) = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}),$$

$$C_{[110]}([110]) = \frac{1}{2}(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44}),$$

$$C_{[100]}([100]) = C_{11},$$

$$C_{[010]}([100]) = C_{[001]}([100]) = C_{[001]}([110]) = C_{44},$$

$$C_{[1\bar{1}0]}([111]) = C_{[11\bar{2}]}([111]) = \frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44}),$$

$$C_{[1\bar{1}0]}([110]) = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}). \quad (5)$$

Первые три комбинации соответствуют продольным акустическим волнам (LA), последние три — поперечным (TA). Далее необходимо учесть, что плотность кристалла $\tilde{\rho}$ также зависит от давления. Представим $\tilde{\rho}$ в виде

$$\tilde{\rho} = \rho \left[1 + (p/B) + \frac{1}{2}(1 - d\tilde{B}/dp)(p/B)^2 \right], \quad (6)$$

где $\rho = 3.21 \text{ g/cm}^3$ [11]. По данным [3] $d\tilde{B}/dp = 3.87$, что вполне удовлетворительно согласуется с экспериментальным значением 3.57 [12].

Результаты расчета скорости звука представлены на рис. 2. Видно, что скорость распространения продольных мод растет с давлением, тогда как скорость поперечных уменьшается. Здесь единственное качественное отличие наших результатов от полученных в работе [3] связано с зависимостью скорости $v_{[001]}([110]) = v_{[010]}([100]) = v_{[001]}([100])$ от давления: в настоящей работе скорость плавно убывает с ростом p , тогда как в [3] функция

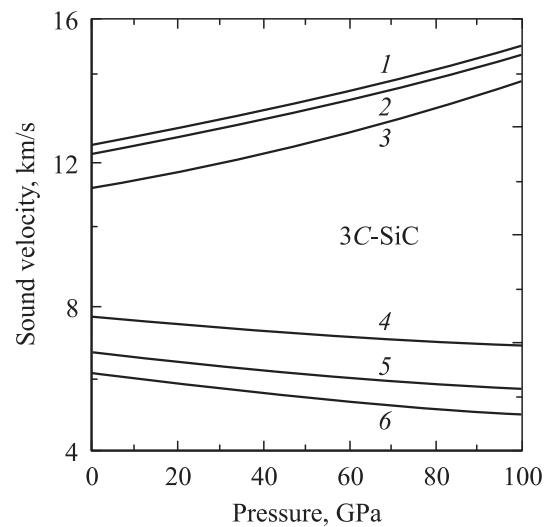


Рис. 2. Зависимость скорости звука в кристалле 3C-SiC от давления. 1 — $v_{LA}([111])$, 2 — $v_{LA}([110])$, 3 — $v_{LA}([100])$, 4 — $v_{TA}([100]) = v_{TA}([110])$, 5 — $v_{TA}([111])$, 6 — $v_{TA}([110])$.

Таблица 1. Значения $(dv_i(\mathbf{q})/dp)_{p \rightarrow 0}$ (в $\text{km/s} \cdot \text{GPa}$). Строки 1–3 — данные настоящей работы, строки 4–6 — данные [3]

№ п/п	Акустическая мода	$\mathbf{q} = [100]$	$\mathbf{q} = [110]$	$\mathbf{q} = [111]$
1	L	0.024	0.026	0.027
2	T	-0.007	-0.019	-0.015
3	T	-0.007	-0.009	-0.015
4	L	0.025	0.036	0.040
5	T	0.007	-0.021	-0.009
6	T	0.007	0.007	-0.009

Таблица 2. Значения параметров Грюнайзена $\gamma_i(\mathbf{q})$. Строки 1–3 — данные настоящей работы, строки 4–6 — данные [3]

№ п/п	Акустическая мода	$\mathbf{q} = [100]$	$\mathbf{q} = [110]$	$\mathbf{q} = [111]$
1	L	0.52	0.52	0.53
2	T	-0.22	-0.76	-0.55
3	T	-0.22	-0.22	-0.55
4	L	0.49	0.63	0.66
5	T	0.17	-0.74	-0.28
6	T	0.17	0.17	-0.28

$v_{\text{TA}}(p)$ имеет максимум при $p \approx 50$ GPa. Значения $(dv_i(\mathbf{q})/dp)_{p \rightarrow 0}$ представлены в табл. 1, где также приведены результаты работы [3]. Основное расхождение (противоположные знаки наклонов) имеет место для мод, определяемых модулем сдвига \tilde{C}_{44} (см. четвертую комбинацию в формулах (5)).

Теперь можно вычислить параметры Грюнайзена $\gamma_i(\mathbf{q})$, определяемые соотношением

$$\gamma_i(\mathbf{q}) = \frac{1}{v_i(\mathbf{q})} \frac{dv_i(\mathbf{q})}{dp} B. \quad (7)$$

Результаты расчета представлены в табл. 2. Вновь основные расхождения имеют место для мод $v_{[001]}([110]) = v_{[010]}([100]) = v_{[001]}([100])$.

3. 2H-SiC: зависимость упругих постоянных второго порядка от давления.

В работе [13] Мартин показал, как, зная \tilde{C}_{ij} для структуры сфалерита, определить упругие постоянные второго порядка для вюрцитной структуры. В [14,15] подход Мартина был распространен на политипы с произвольным соотношением сфалеритной и вюрцитной структур. Таким образом, воспользовавшись формулами (1), можно записать выражения для \tilde{C}_{ij} гексагональной структуры карбида кремния 2H-SiC, что и было проделано в работе [16]. Подставляя определенные выше значения силовых констант α и β , при $p = 0$ получим (в GPa): $C_{11} = 476$, $C_{33} = 507$, $C_{44} = 142$, $C_{12} = 147$, $C_{13} = 116$, $C_{66} = (1/2)(C_{11} - C_{12}) = 164.5$. Отметим, что найденные здесь значения упругих постоянных превышают полученные нами ранее в мо-

дели Китинга–Харрисона [17] и лучше согласуются с экспериментальными данными [11] (в GPa): $C_{11} = 500$, $C_{33} = 564$, $C_{44} = 168$, $C_{12} = 92$, $C_{66} = 204$ (данные для C_{13} в [11] отсутствуют).

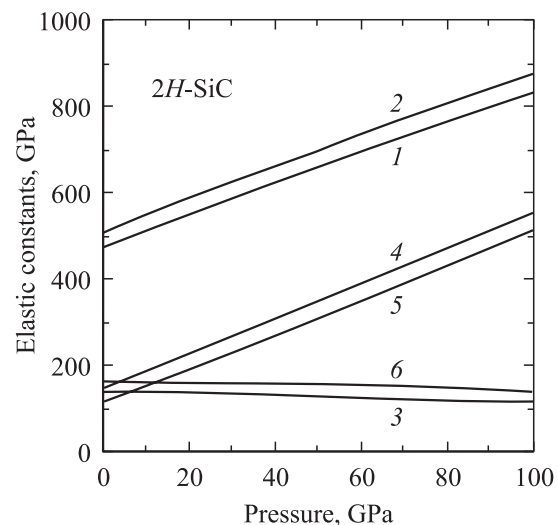
Зависимости \tilde{C}_{ij} от давления представлены на рис. 3, откуда следует, что упругие модули как функции давления распадаются на три группы, близкие как по величине \tilde{C}_{ij} , так и по $d\tilde{C}_{ij}/dp$: \tilde{C}_{11} и \tilde{C}_{33} , \tilde{C}_{12} и \tilde{C}_{13} , \tilde{C}_{44} и \tilde{C}_{66} . Упругие модули первых двух групп растут с давлением, модули третьей группы убывают. К сожалению, какие-либо экспериментальные данные по упругим модулям 2H-SiC нам неизвестны.

Интересно отметить, что при произвольном соотношении вюрцитной и сфалеритной фаз (тригональная система, класс 32 [18]) некоторые комбинации упругих постоянных C_{ij}^* (звездочка относится к тригональной структуре) являются инвариантными [14]

$$\begin{aligned} C_{11}^* + C_{12}^* &= \frac{2}{3}(C_{11} + 2C_{12} + C_{44}), \\ C_{13}^* &= \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}), \\ C_{33}^* &= \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}), \end{aligned} \quad (8)$$

где в правой части выражений стоят упругие постоянные кубического кристалла. Отсюда, в частности, следует, что скорость акустической продольной волны $v_{\text{LA}}([111])$, определяемая упругой постоянной C_{33}^* , также инвариантна относительно структуры смешанного вюрцитносфалерического кристалла.

Знание зависимости \tilde{C}_{ij} от p позволяет определить соответствующие зависимости скорости звука от давления. В работе [3] вычислялась зависимость $v_h(p)$ для поперечной акустической волны, распространяющейся в направлении $(\mathbf{x} + \mathbf{y})/\sqrt{2}$, где \mathbf{x} совпада-

**Рис. 3.** Зависимость упругих постоянных кристалла 2H-SiC от давления. 1 — \tilde{C}_{11} , 2 — \tilde{C}_{33} , 3 — \tilde{C}_{44} , 4 — \tilde{C}_{12} , 5 — \tilde{C}_{13} , 6 — \tilde{C}_{66} .

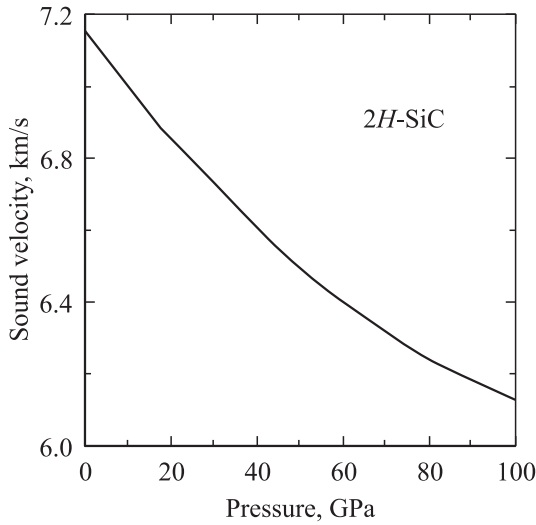


Рис. 4. Зависимость скорости звука v_h в кристалле $2H\text{-SiC}$ от давления.

ет с направлением гексагональной c -оси, а y лежит в базовой плоскости, перпендикулярной c -оси.² При этом полагаем, что $v_h(p) = \sqrt{C_{66}^h/\rho} = \sqrt{\bar{C}_{66}/\rho}$ и $\bar{C}_{66} = (1/6)(C_{11}^c - C_{12}^c + 4C_{44}^c)$, где верхние индексы указывают на гексагональную (h) или кубическую (c) модификацию. В [13], однако, показано, что $C_{66}^h = \bar{C}_{66} - \Delta^2/\bar{C}_{44}$, где $\bar{C}_{44} = (1/3)(C_{11}^c - C_{12}^c + C_{44}^c)$ и $\Delta = (C_{11}^c - C_{12}^c - 2C_{44}^c)/3\sqrt{2}$ (см. поправки в [14,15]). Рассчитанная нами на основании теории [13] зависимость $v_h(p)$ представлена на рис. 4. В отличие от работы [3], где изменение скорости δv_h в интервале давлений от нуля до 100 GPa равно 0.35 km/s, полученное в настоящей работе значение $\delta v_h \approx 1$ km/s.

4. $3C\text{-SiC}$: упругие постоянные третьего порядка.

Модель силового поля для расчета упругих постоянных третьего порядка \tilde{C}_{ijk} кубических кристаллов также была предложена Китингом [19]. В рамках этой модели имеем

$$C_{111} = \gamma - \delta + 9\varepsilon,$$

$$C_{112} = \gamma - \delta + \varepsilon,$$

$$C_{123} = \gamma + 3\delta - 3\varepsilon,$$

$$C_{144} = \gamma(1 - \xi)^2 + \delta(1 + \xi)^2 + \varepsilon(1 + \xi)(3\xi - 1) + C_{12}\xi^2,$$

$$C_{166} = \gamma(1 - \xi)^2 - \delta(1 + \xi)^2 + \varepsilon(1 + \xi)(3 - \xi) + C_{12}\xi^2,$$

$$C_{456} = \gamma(1 - \xi)^3. \quad (9)$$

Здесь γ , δ и ε — ангармонические силовые константы, первая из которых относится к центральному взаимодействию ближайших соседей, а последние две — к нецентральному взаимодействию вторых соседей, ξ —

² Это направление распространения акустической волны интересно прежде всего тем, что соответствующая сдвиговая орторомбическая деформация ведет к переходу вюрцитной структуры в структуру NaCl [3].

параметр Клейнмана.³ Для нахождения этих констант воспользуемся данными работы [20], где для кубических кристаллов была определена связь упругих постоянных C_{ij} и C_{ijk} с производными $d\tilde{C}_{ij}/dp$

$$\frac{d\tilde{C}_{11}}{dp} = -1 - \frac{C_{11} + C_{111} + 2C_{112}}{3B},$$

$$\frac{d\tilde{C}_{12}}{dp} = 1 - \frac{C_{12} + C_{123} + 2C_{112}}{3B},$$

$$\frac{d\tilde{C}_{14}}{dp} = -1 - \frac{C_{44} + C_{144} + 2C_{166}}{3B}. \quad (10)$$

Подчеркнем, что эти соотношения справедливы лишь в линейном по давлению приближении. Уравнения (10) позволяют найти константы γ , δ и ε при условии, что нам известны значения $d\tilde{C}_{ij}/dp$. Поскольку величина производной $d\tilde{C}_{44}/dp$ вызывает определенные сомнения, упростим задачу, положив $\varepsilon = -\delta$. Для кремния это равенство выполняется точно [19], однако и для других полупроводниковых кристаллов константы δ и ε являются величинами одного порядка и противоположных знаков (см., например, работы [21,22] и ссылки в них). Кроме того, константа γ приблизительно на порядок больше δ и $|\varepsilon|$, поэтому сделанное нами упрощение не вносит большой ошибки в расчет.

Тогда, исходя из двух первых соотношений (9) и результатов работы [3], получим $\gamma = -862$ GPa и $\delta = 82$ GPa.

Окончательно находим (в GPa): $C_{111} = -1680$, $C_{112} = -1026$, $C_{123} = -371$, $C_{144} = 3$, $C_{166} = -621$, $C_{456} = -69.5$. Хотя экспериментальные значения упругих постоянных третьего порядка карбида кремния нам неизвестны, сопоставление результатов расчета с величинами C_{ijk} для кристаллов Si, Ge, InSb и GaAs [19,21] показывает, что полученные нами значения вполне разумны. Действительно, у всех этих кристаллов только постоянная C_{144} положительна, причем на один-два порядка меньше $|C_{111}|$. Далее, наблюдаются следующие неравенства: $|C_{111}| > |C_{112}| > |C_{166}| > |C_{123}|$, $|C_{456}| > C_{144}$. Те же закономерности получены и нами.

Воспользовавшись последней формулой из (9) и определенными выше значениями ангармонических констант, рассчитаем величину производной $d\tilde{C}_{44}/dp$. Получаем $d\tilde{C}_{44}/dp = -1.08$. Согласно приведенным в разделе 1 расчетным данным, усредненное в интервале давлений от 0 до 100 GPa значение $d\tilde{C}_{44}/dp \approx -0.18$, что совпадает хотя бы по знаку. По данным работы [3] $d\tilde{C}_{44}/dp = 1.58$, что и приводит к ошибочному, на наш взгляд, выводу о немонотонной зависимости скорости распространения $v_{TA}(p)$ (см. раздел 2).

³ Здесь, как и в случае упругих постоянных второго порядка, вновь пренебрегаем кулоновскими вкладами и полагаем $\delta = (1/2)(\delta_1 + \delta_2)$ и $\varepsilon = (1/2)(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, где индексы 1 и 2 относятся к атомам кремния и углерода соответственно.

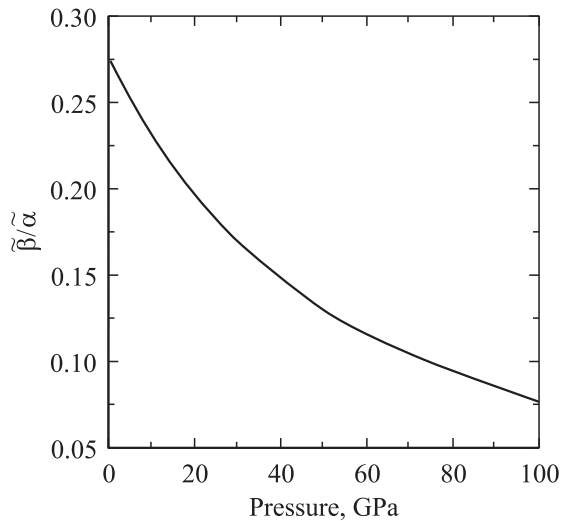


Рис. 5. Зависимость отношения силовых констант нецентрального и центрального взаимодействия $\tilde{\beta}/\tilde{\alpha}$ от давления.

При определении констант γ и δ по формулам (10) мы использовали значения dC_{11}/dp и dC_{12}/dp из [3]. Однако, представив эти производные соответственно в виде $(a + 3b)/4a_0$ и $(a - b)/4a_0$, мы можем проверить найденные нами выше значения констант a и b . Тогда получаем $a = 17.14 \text{ \AA}$, $b = -0.59 \text{ \AA}$, что отлично согласуется с использованными ранее значениями $a = 17.08 \text{ \AA}$, $b = -0.62 \text{ \AA}$ (см. раздел 1). Столь хорошее соответствие полученных различными способами силовых констант является следствием слабой нелинейности $\tilde{C}_{44}(p)$.

Вычислим теперь интегральный параметр Грюнайзера $\bar{\nu}$, который определяется следующей формулой [22]:

$$\bar{\nu} = -\frac{5\alpha - \beta + 4a_0(3\gamma - \delta + \varepsilon)}{6(\alpha + \beta)}, \quad (11)$$

вновь положив $\varepsilon = -\delta$. Тогда имеем $\bar{\nu} = 0.98$, что практически совпадает с параметром Грюнайзера ν_{LA} , рассчитанным в работе [23] для продольных акустических волн.

В заключение отметим, что исследование влияния давления на тетраэдрические кристаллы интересно прежде всего в связи с наличием фазового перехода от структуры сфалерита или вюрцита к структуре каменной соли при высоком давлении (см., например, работы [24–26] и ссылки в них). В рамках модели Китинга–Мартина отношение силовых констант β/α уменьшается с ростом ионности f_i связи, т.е. при переходе от чисто ковалентных полупроводников IV группы к тетраэдрическим соединениям A_1B_7 , лежащим по шкале f_i на границе с кристаллами, обладающими структурой NaCl [5,6,9,21,24]. На рис. 5 представлено отношение $\tilde{\beta}/\tilde{\alpha}$ в зависимости от давления p . Из этого рисунка следует, что влияние нецентральных сил по сравнению с силами центральными с давлением уменьшается, что и характерно для ионных кристаллов.

Таким образом, в настоящей работе мы показали, что простая модель Китинга может успешно конкурировать с расчетами из первых принципов и давать при этом более адекватное описание целого ряда упругих характеристик тетраэдрических кристаллов.

Список литературы

- [1] Г. Лейбфрид. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. ГИФМЛ, М. (1963).
- [2] Х. Бёттер. Принципы динамической теории решетки. Мир, М. (1986).
- [3] M. Prikhodko, M.S. Miao, W.R.L. Lambrecht. Phys. Rev. B **66**, 125 201 (2002).
- [4] P.N. Keating. Phys. Rev. **145**, 2, 637 (1966).
- [5] С.П. Никаноров, Б.К. Кардашев. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. Наука, М. (1985).
- [6] R.M. Martin. Phys. Rev. B **1**, 11, 4005 (1970).
- [7] У. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел. Т. 1. Мир, М. (1983).
- [8] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. ФТП **32**, 9, 1057 (1998).
- [9] J.C. Phillips. Rev. Mod. Phys. **42**, 3, 317 (1970).
- [10] В.М. Грабов, С.Ю. Давыдов, Ю.П. Миронов, А.М. Джумиго. ФТТ **27**, 7, 2017 (1985).
- [11] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991).
- [12] И.В. Александров, А.Ф. Гончаренко, С.М. Стишов, Е.В. Яковенко. Письма в ЖЭТФ **50**, 3, 116 (1989).
- [13] R.M. Martin. Phys. Rev. B **6**, 12, 4546 (1972).
- [14] А.И. Губанов, С.Ю. Давыдов. ФТТ **17**, 5, 1463 (1975).
- [15] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. ФТТ **37**, 7, 2221 (1995).
- [16] С.Ю. Давыдов, А.В. Соломонов. Письма в ЖЭТФ **25**, 15, 23 (1999).
- [17] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. ФТП **30**, 7, 1300 (1996).
- [18] Дж. Най. Физические свойства кристаллов. Мир, М. (1967).
- [19] P.N. Keating. Phys. Rev. **149**, 2, 674 (1966).
- [20] P. Birch. Phys. Rev. **71**, 5, 809 (1947).
- [21] С.Ю. Давыдов. Автореф. канд. дис. ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, Л. (1974).
- [22] M.I. Bell. Phys. Stat. Sol. (b) **53**, 3, 675 (1972).
- [23] K. Karch, P. Pavone, W. Windl, O. Schutt, D. Strauch. Phys. Rev. B **50**, 24, 17 054 (1994).
- [24] J.C. Phillips. Bonds and bands in semiconductors. Academic, N.Y. (1960).
- [25] J.A. Majewski, P. Vogl. Phys. Rev. B **35**, 18, 9666 (1987).
- [26] A.J. Skinner, J.P. LaFemia. Phys. Rev. B **45**, 7, 3557 (1992).