

УДК 538.913

© 1992

## СЕРИИ ТЕРМОВ И ПОЛОС СВЯЗАННЫХ ВОЗБУЖДЕННЫХ МНОГОФОНОННЫХ КОЛЕБАНИЙ

О. А. Дубовский, А. В. Орлов

Исследуется спектр бифононов и трифононов в ангармонических кристаллах с неконтактным потенциалом взаимодействия колебательных возбуждений. Показано, что каждый из термов бифононов или трифононов, исследованных ранее теоретически и обнаруженных впоследствии экспериментально в гидридах металлов и молекулярных кристаллах, может быть лишь начальным в целой серии колебательных термов, отвечающих возбужденным бифононам и трифононам. Получено точное аналитическое решение для волновых функций и энергии бифононов в одномерном кристалле. Методом обратной задачи исследован спектр трехфононных колебаний. Наряду с серией термов возбужденных трифононов найдена аномально узкая полоса трифононов нового типа. Показано, что в спектре колебаний вблизи полос диссоциированных состояний возможно образование двух и более «ефимовских» точек сгущения термов трифононов с чрезвычайно большим радиусом.

В настоящее время ведутся экспериментальные исследования связанных многофононных возбуждений в кристаллах с сильным ангармонизмом колебаний — в молекулярных кристаллах [1] методом ИК-спектроскопии, в гидридах металлов [2] методом неупругого рассеяния нейтронов и т. д. В [1, 2] в спектрах колебаний обнаружены новые резонансные пики, которые авторами этих работ интерпретируются как отвечающие связанным бифононам и трифононам, первоначально найденным теоретически в работах [3–7]. В молекулярном кристалле  $\text{CO}_2$  [1] резонансы наблюдались в области энергий  $1910\text{--}1940\text{ см}^{-1}$ , отвечающей утроенной энергии соответствующих оптических фононов ( $660\text{ см}^{-1}$ ), в гидриде титана  $\text{TiH}_{0.74}$  [2] — в области  $250\text{--}500\text{ мэВ}$ , включающей полосы удвоенной и утроенной энергии оптических фононов ( $154\text{ мэВ}$ ).

Двухчастичное взаимодействие возбуждений приводит в области энергий двухфононных колебаний к отщеплению от зоны диссоциированных состояний фонов + фонов ( $P + P$ ) полосы связанных бифононных колебаний ( $BP$ ) [3, 6]. Бифононные колебания и проявляются в экспериментах [2] в виде отдельных резонансов. Более сложная картина в области энергии трехфононных колебаний. В этой области также существует зона несвязанных трехфононных колебаний ( $P + P + P$ ), однако присутствует и зона диссоциированных состояний  $BP + P$ . Связанные трехфононные колебания — трифононы — могут существовать либо в основном ( $TP$ ), либо в возбужденном ( $TP^*$ ) состоянии, причем полоса  $TP$  является наиболее низкочастотной, а две полосы  $TP^*$  отщепляются от двух границ  $BP + P$  зоны [5, 6]. Связанные  $TP$  и  $TP^*$  колебания и проявлялись в экспериментах [1, 2] в виде отдельных резонансов.

В [3–7] при детализации механизма взаимодействия фононов использовалась модель контактного взаимодействия возбуждений [3, 5–7], или по-прежнему контактного, но зависящего от суммарного импульса двух возбуждений взаимодействия [4]. В настоящей работе показано, что в реальных кристаллах при двухчастичном взаимодействии более общего, чем в [3–7], вида, зависящего от относительных степеней свободы в системе двух и трех возбуждений, возможно существование целой серии термов и полос связанных многофононных возбуж-

дений. При этом одиночные термы и полосы исследованных ранее связанных возбуждений являются лишь начальными в этих сериях. Для связанных двухфононных колебаний найдено точное аналитическое решение, анализ которого показывает, что наряду с термом бифонана в основном состоянии  $BP$  между  $BP$  термом и  $P+P$  зоной существует при определенных условиях серия термов бифонов в возбужденных состояниях  $BP^*$  со сгущением высокочастотных термов. Для связанных трехфононных колебаний полученное численное решение соответствующего дисперсионного уравнения показывает, что последовательность термов и полос связанных колебаний в этом случае еще более сложна. Наряду с полосами диссоциированных состояний  $P+P+P$  и  $BP+P$  существуют дополнительные полосы несвязанных состояний  $BP^*+P$ . Одновременно с термом трифонана в основном состоянии  $TP$  между этим термом и  $BP+P$  полосой существует целая серия сгущающихся термов возбужденных трифонов  $TP_1^*$ .<sup>1</sup> Кроме того, исключительно вследствие неконтактного характера взаимодействия возбуждений в области между  $BP+P$  и  $BP^*+P$  полосами присутствует выделенная полоса связанных трехфононных колебаний принципиально нового типа  $TP_2$  с локализацией возбуждений на трех различных узлах решетки. Наконец, вблизи низкочастотного края  $BP^*+P$  полосы существует дополнительная серия термов трифонов  $TP_3^*$ . В результате вместо одной характерной «ефимовской» [5] точки сгущения термов связанных трехчастичных состояний, исследованных в ядерной физике [8] (в частности, в связи с мюонным катализом), исключительно вследствие зонного характера возбуждений в кристаллических материалах возможно существование двух и более точек или даже областей сгущения такого типа. Отметим, что «ефимовские» состояния отличаются аномально большим радиусом связанных трехчастичных состояний, существенно превосходящим радиус двухчастичных состояний.

Возможно, более детальная интерпретация имеющихся в виде мультирезонансных спектров экспериментальных данных и дальнейшее улучшение разрешения экспериментальных установок позволят наблюдать такие серии термов связанных многофононных колебаний (СМФК). Полученные результаты могут представлять интерес также при анализе спектров связанных многоэкситонных состояний в области видимого света 2—3 эВ. Вывод о возможности существования множества точек или даже областей сгущения термов связанных трехчастичных состояний «ефимовского» типа также может представлять интерес для исследований в области более высоких энергий.

При учете ангармонизма 4-го порядка гамильтониан центросимметричного кристалла в волновом представлении вторичного квантования имеет общий вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^+ \hat{B}_{\mathbf{k}} + \hat{H}_{\text{int}},$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} A(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{B}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{B}_{\mathbf{K}-\mathbf{k}_1}^+ \hat{B}_{\mathbf{k}_2} \hat{B}_{\mathbf{K}-\mathbf{k}_2},$$
(1)

где  $\hat{B}_{\mathbf{k}}^+$ ,  $\hat{B}_{\mathbf{k}}$  — Бозе-операторы рождения, уничтожения возбуждения;  $E_{\mathbf{k}}$  — энергия фонана с волновым вектором  $\mathbf{k}$ ;  $A(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  — в общем случае достаточно сложная функция сохраняющегося суммарного волнового вектора  $\mathbf{K}$  и волновых векторов относительного движения  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ ;  $N$  — число атомов в основном объеме. В случае контактного взаимодействия возбуждений [3, 5–7] функциональная зависимость  $A(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  не учитывается и спектр СМФК определяется константой  $A_0 \equiv A(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  в  $H_{\text{int}}^{(0)}$ , имеющим в узельном представлении следующий вид:

<sup>1</sup> В наблюдаемом экспериментально спектре [1] серия такого типа, по-видимому, и проявляется.

$$\hat{H}_{\text{int}}^{(0)} = -A_0 \sum_n \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n,$$

$$\hat{B}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{B}_k \exp(ikn). \quad (2)$$

При учете только зависимости функции  $A(K, k_1, k_2)$  от суммарного волнового вектора  $K$  ( $A(K, k_1, k_2) \equiv A^{(1)}(K)$ ) [4] гамильтониан взаимодействия  $\hat{H}_{\text{int}}^{(0)}$  имеет вид

$$\hat{H}_{\text{int}}^{(1)} = \sum_{n,m} A_{n-m}^{(1)} \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_m \hat{B}_m,$$

$$A_{n-m}^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_k A^{(1)}(K) \exp[iK(n-m)], \quad (3)$$

т. е. взаимодействие остается контактным. При этом результаты, полученные с использованием (3) ([4]), хотя и модифицируют спектр связанных многофононных колебаний относительно полученных с использованием (2), тем не менее в принципиальном отношении не вносят существенных моментов.

В реальных кристаллах вид функции  $A(K, k_1, k_2)$ , естественно, гораздо более сложен, чем в (2), (3). Взаимодействие возбуждений в общем случае является неконтактным и зависит (в узельном представлении) очевидно, от расстояния между квазичастицами. Для определения нелинейных членов 4-го порядка по операторам  $\hat{B}^+$ ,  $\hat{B}$  в квартичном гамильтониане (1) необходимо провести операторное разложение по  $\hat{B}^+$ ,  $\hat{B}$  коэффициентов первичного, квадратичного по  $\hat{B}^+$ ,  $\hat{B}$  гамильтониана [3, 4]. При этом  $H_{\text{int}}$  включает члены типа  $\hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_m \hat{B}_m$  и члены типа  $\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_n \hat{B}_m$ . Учет членов первого и второго типов только с  $n = m$  реализуется в (2), учет только членов первого типа — в (3). Между тем коэффициенты при  $\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_n \hat{B}_m$  имеют в общем случае тот же порядок величины, что и коэффициенты при  $\hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_m \hat{B}_m$ . В настоящей работе мы рассмотрим более общий, чем в (2), случай неконтактного взаимодействия, учитывая только члены второго типа, поскольку учет членов первого типа не приводит к принципиально новым эффектам, лишь модифицируя зависимость спектра возбуждений от полного волнового вектора  $K$ . При этом в узельном представлении  $H_{\text{int}}$  имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \sum_{n,m} A_{n-m} \hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_n \hat{B}_m, \quad (4)$$

т. е. в этом случае взаимодействие является неконтактным, зависит от взаимного расстояния между возбуждениями и только в частном случае зависимости  $A_{n-m} = A_0 \delta_{n,m}$  оно является контактным и (4) совпадает с (2). Соответственно (4) в волновом представлении (1) функция  $A(K, k_1, k_2)$  имеет вид

$$A(K, k_1, k_2) = A(k_1 - k_2), \quad A(k) = \sum_n A_n \exp(-ikn). \quad (5)$$

Таким образом, функция  $A(K, k_1, k_2)$  зависит только от разности волновых векторов относительного движения  $k_1, k_2$ . Последующий учет зависимости этой функции от  $K$  не представляет принципиальных затруднений. Подчеркнем, что зависимость (4), (5) энергии взаимодействия возбуждений от волновых векторов относительного движения возбуждений является достаточно общей и реализуется

в ряде физических процессов, например при двухчастичном взаимодействии электронов и т. д. [9].

Найдем спектр связанных бифононных колебаний в кристалле с гамильтонианом (1), (4), (5). Решение уравнения Шредингера  $\hat{H}|2\rangle = E|2\rangle$  ищется в виде

$$|2\rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{k}}^+ \hat{B}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}}^+ |0\rangle, \quad (6)$$

где  $E$  — энергия и  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$  — волновая функция бифонона. Подстановкой (6) в уравнение Шредингера с последующим использованием соответствующих коммутационных соотношений для операторов  $\hat{B}_{\mathbf{k}}^+, \hat{B}_{\mathbf{k}}$  [3-7] можно показать, что энергия и волновая функция бифонона определяются как решения уравнения

$$(E - E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{k}}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = -2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}). \quad (7)$$

Точный вид функциональной зависимости  $A(n-m)$  и соответственно  $A(\mathbf{q})$  в реальных кристаллах определяются квартичными составляющими соответствующих потенциальных кривых и, по-видимому, в каждом конкретном случае достаточно сложен, и этот вопрос является предметом соответствующей микро-теории. Однако ясно, по крайней мере, что последовательность  $A_n$  является убывающей. Найдем решение интегрального уравнения (7) для конкретной модели одномерного кристалла при учете энергии взаимодействия ближайших соседей, определяющей дисперсию однофононных возбуждений. При этом дисперсионная зависимость энергии оптического фонона  $E_{\mathbf{k}}$  от волнового вектора  $k$  имеет вид

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 - 2V \cos(ka), \quad V > 0, \quad (8)$$

где  $E_0$  — центр полосы оптических фононов,  $a$  — постоянная кристаллической цепочки и  $V$  — энергия взаимодействия ближайших соседей. Из (5) следует, что, поскольку в силу симметрии  $A_n = A_{-n}$ , функция  $A(k)$  может быть представлена в виде соответствующего разложения:

$$A(k) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n (2 - \delta_{n0}) \cos(kna). \quad (9)$$

Связанные многофононные колебания симметричны относительно преобразования  $k \rightarrow K-k$ , т. е.  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{K}-\mathbf{k})$ . При этом уравнение (7) может быть представлено в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \left\{ E - 2E_0 + 4V \cos\left(\frac{Ka}{2}\right) \cos\left[\left(k - \frac{K}{2}\right)a\right] \right\} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = \\ & = -2 \sum_{n=0}^{\infty} A_n (2 - \delta_{n0}) \cos\left[\left(k - \frac{K}{2}\right)na\right] \sum_{\mathbf{q}} \cos\left[\left(q - \frac{K}{2}\right)na\right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (10)$$

Точное аналитическое решение (10) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = & \frac{4V}{E - 2E_0 + 4V \cos(Ka/2) \cos[(k - K/2)a/2]} C + \\ & + \sum_{n=0}^{\infty} b_n \cos[(k - K/2)na], \end{aligned} \quad (11)$$

где  $C$ ,  $b_n$  — соответствующие коэффициенты, определенные ниже. Отметим, что волновая функция  $\varphi_K(k)$  может быть найдена с точностью до несущественного для данного рассмотрения постоянного множителя, определяемого из соответствующего условия нормировки. Поэтому один из коэффициентов  $C$ ,  $b_n$ , в частности  $C$ , может быть выбран таким множителем как соответствующей константой нормировки, что и предполагается в дальнейшем.

Подстановка (11) в (10) после некоторых преобразований приводит к уравнению для коэффициентов  $b_n$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{(\tilde{E} + 2\tilde{A}_n) b_n + 0.5b_{n+1} + 0.5b_{n-1} (1 + \delta_{n,1}) + C [2\tilde{A}_n (2 - \delta_{n,0}) f_n(\tilde{E}) + \delta_{n,0}]\} \cos [(k - K/2) na] = 0,$$

$$\tilde{E} \equiv \tilde{E}(K) = (E - 2E_0) / [4V \cos (Ka/2)],$$

$$\tilde{A}_n \equiv A_n(K) = A_n / [4V \cos (Ka/2)],$$

$$f_n(\tilde{E}) \equiv \frac{1}{N} \sum_k \frac{\cos (kna)}{\tilde{E} + \cos (ka)}, \quad b_{-1} \equiv 0, \quad (12)$$

где введены соответствующие безразмерные энергетические величины  $\tilde{E}$ ,  $\tilde{A}_n$ , зависящие от полного волнового вектора  $K$ , который в дальнейшем в промежуточных расчетах для сокращения записи опускается. Из (12) следует, что коэффициенты  $b_n$  удовлетворяют следующей системе уравнений, имеющей вид рекуррентного соотношения

$$(\tilde{E} + 2\tilde{A}_n) b_n + 0.5b_{n+1} + 0.5b_{n-1} (1 + \delta_{n,1}) = -C \times \\ \times [\delta_{n,0} + 2\tilde{A}_n (2 - \delta_{n,0}) f_n(\tilde{E})]. \quad (13)$$

Решение системы уравнений (13) ищется в виде следующего операционного соотношения, определяющего, в отличие от (13), непосредственно последующий коэффициент  $b_{n+1}$  как функцию только одного предыдущего коэффициента  $b_n$

$$b_{n+1} = 2 [D_n(\tilde{E}) b_n - \Delta_n(\tilde{E}) C], \quad n \geq 0. \quad (14)$$

В (14)  $D_n(\tilde{E})$  и  $\Delta_n(\tilde{E})$  — определенные ниже функции, являющиеся фактически соответствующими детерминантами меньшего ранга в полном детерминанте, составленном из коэффициентов системы уравнений (12) для  $C$ ,  $b_n$ . Само соотношение (14) может быть получено также в результате последовательного исключения в (12) коэффициентов  $b_n$  с последовательно возрастающим значением  $n = 0, 1, 2, \dots$

Подстановка  $b_{n-1}$  как функции  $b_n$  из (14) в (13) и повторное применение (14) приводят к следующему операционному решению, определяющему, во-первых,  $D_n(\tilde{E})$  как функцию  $D_{n-1}(\tilde{E})$ :

$$D_n(\tilde{E}) = -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_n) - 0.25(1 + \delta_{n,1}) [D_{n-1}(\tilde{E})]^{-1}, \quad D_{-1}^{-1} \equiv 0 \quad (15)$$

и, во-вторых,  $\Delta_n(\tilde{E})$  как функцию  $D_{n-1}(\tilde{E})$  и  $\Delta_{n-1}(\tilde{E})$

$$\Delta_n(\tilde{E}) = [\delta_{n,0} + 2\tilde{A}_n (2 - \delta_{n,0}) f_n(\tilde{E})] + 0.5(1 + \delta_{n,1}) [D_{n-1}(\tilde{E})]^{-1} \Delta_{n-1}(\tilde{E}), \\ \Delta_{-1} \equiv 0. \quad (16)$$

Используя (13) и (14), можно сказать, что, если в последовательности  $A_n$  мы ограничимся первыми  $M+1$  членами ( $M = 0, 1, 2, \dots$ ), т. е. положим

$A_n \neq 0$  при  $n \leq M$  и пренебрежем остальными членами, т. е.  $A_n = 0$  при  $n > M$ , то энергия связанных бифононных колебаний будет определяться из уравнения

$$\Delta_M(\tilde{E}) = 0, \quad (17a)$$

причем коэффициент  $b_{M-1}$  равен

$$b_{M-1} = \frac{\Delta_{M-1}(\tilde{E})}{D_{M-1}(\tilde{E})} C. \quad (17b)$$

Уравнение (17b) фактически является условием обращения в нуль коэффициента  $b_M$  (см. (14)), т. е.  $b_M = 0$ , и, в соответствии с (17a), (14) коэффициент  $b_{M+1}$  также равен нулю  $b_{M+1} = 0$ . Таким образом, в соответствии с (13) при обрыве ряда (9) реализуется соответствующий обрыв ряда (11) для волновой функции.

Проиллюстрируем это на примерах обрывания ряда (9) при  $M = 0, 1, 2$ . В том случае, когда учитывается только контактное взаимодействие  $A_0 \neq 0$ ,  $A_n = 0$  при  $n > 0$ , имеем  $M = 0$  и из (14)–(17) находим

$$D_0(\tilde{E}) = -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0), \quad b_n = 0, \quad n > 0, \quad (18a)$$

$$\Delta_0(\tilde{E}) = 1 + 2\tilde{A}_0 G(\tilde{E}) = 0, \quad (18b)$$

где  $G(\tilde{E})$  — соответствующая функция Грина

$$G(\tilde{E}) \equiv f_0(\tilde{E}) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\tilde{E} + \cos(ka)}. \quad (18b)$$

Уравнение (18b) совпадает с соответствующим уравнением для определения энергии бифонаона, исследованным ранее в [3–7] в приближении контактного взаимодействия. В том случае, когда учитывается только два члена в последовательности  $A_n$ , т. е.  $A_0 \neq 0$ ,  $A_1 \neq 0$ ,  $M = 1$ ,  $A_n = 0$  при  $n > 1$ , имеем из (14)–(18)

$$D_1(\tilde{E}) = -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_1) - \frac{1}{2} [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)]^{-1},$$

$$b_0 = \frac{\Delta_0(\tilde{E})}{D_0(\tilde{E})} C, \quad b_n = 0, \quad n > 1, \quad (19a)$$

$$\Delta_1(\tilde{E}) = 4\tilde{A}_1 f_1(\tilde{E}) + [1 + 2\tilde{A}_0 f_0(\tilde{E})] [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)]^{-1} = 0. \quad (19b)$$

Отметим, что поскольку

$$f_1(\tilde{E}) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\cos(ka)}{\tilde{E} + \cos(ka)} = 1 - \tilde{E} G(\tilde{E}), \quad (20)$$

уравнение (19b) для определения энергии бифонаона, как и (18b), линейно по  $G$ . Наконец, в том случае, когда учитываются первые три члена в последовательности  $A_n$ , т. е.  $A_0 \neq 0$ ,  $A_1 \neq 0$ ,  $A_2 \neq 0$ ,  $M = 2$ ;  $A_n = 0$  при  $n > M$ , имеем из (14)–(17) следующее:

$$D_2(\tilde{E}) = -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_2) - \frac{1}{4} \left[ -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_1) - \frac{1}{2} [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)]^{-1} \right]^{-1}, \quad (21a)$$

$$b_0 = \left[ \frac{\Delta_1(\tilde{E})}{2D_1(\tilde{E})} + \Delta_0(\tilde{E}) \right] D_0^{-1}(\tilde{E}) C,$$

$$b_1 = \frac{\Delta_1(\tilde{E})}{D_1(\tilde{E})} C, \quad b_n = 0, \quad n \geq 2, \quad (216)$$

$$\Delta_2(\tilde{E}) = 4\tilde{A}_2 f_2(\tilde{E}) + \frac{1}{2} \left[ 4\tilde{A}_1 f_1(\tilde{E}) + (1 + 2\tilde{A}_0 f_0(\tilde{E})) [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)]^{-1} \right] \times \\ \times \left[ -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_1) - \frac{1}{2} [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)]^{-1} \right]^{-1} = 0. \quad (21в)$$

Аналогично (20) функция  $f_2(\tilde{E})$  может быть представлена в следующем виде:

$$f_2(\tilde{E}) \equiv \frac{1}{N} \sum_k \frac{\cos(2ka)}{\tilde{E} + \cos(ka)} = -2\tilde{E} + (2\tilde{E}^2 - 1) G(\tilde{E}), \quad (22)$$

и, следовательно, уравнение (21в) также является линейным по  $G$ .

Уравнения (186), (196) и (21в) могут быть также получены непосредственно из системы уравнений (7) сведением ее к системе уравнений для моментов  $T_n = \sum_k \cos(kna) \psi_0(k)$  ( $n=0, n \leq 1, n \leq 2$  соответственно для (186), (196), (21в)).

В общем случае произвольного значения  $M > 2$ , последовательно применяя соотношения (14)–(17), получаем общее решение в следующем виде:

$$D_M(\tilde{E}) = -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_M) - \frac{1}{4} \left[ -(\tilde{E} + 2\tilde{A}_{M-1}) - \right. \\ \left. - \frac{1}{4} [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_{M-2}) - \dots - \frac{1}{2} [-(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)]^{-1} \dots]^{-1} \right], \\ b_{M-1} = \frac{\Delta_{M-1}(\tilde{E})}{D_{M-1}(\tilde{E})} C, \quad b_{M-2} = \frac{1}{D_{M-2}(\tilde{E})} \left[ \frac{\Delta_{M-1}(\tilde{E})}{2D_{M-1}(\tilde{E})} + \right. \\ \left. + \Delta_{M-2}(\tilde{E}) \right] C, \dots, \quad (23а)$$

$$b_{M-n} = \frac{1}{D_{M-n}} \left[ \frac{1}{2D_{M-n+1}} \left[ \frac{1}{2D_{M-n+2}} \dots \left[ \frac{\Delta_{M-1}}{2D_{M-1}} + \Delta_{M-2} \right] \dots + \right. \right. \\ \left. \left. + \Delta_{M-n+1} \right] + \Delta_{M-n} \right] C, \quad (23б)$$

$$\Delta_M(\tilde{E}) = 4\tilde{A}_M f_M(\tilde{E}) + \frac{1}{2} D_{M-1}^{-1}(\tilde{E}) [4\tilde{A}_{M-1} f_{M-1}(\tilde{E}) + \\ + \dots [D_0^{-1}(\tilde{E}) (1 + 2\tilde{A}_0 f_0(\tilde{E}))] \dots]. \quad (23в)$$

Зависимости  $\Delta_{M'}(\tilde{E})$  с  $M' < M$ , входящие в (23б), определяются тем же функциональным соотношением, что и в (23в) при  $M' = M$ . Функции  $f_n(\tilde{E})$ , определенные в (12) и входящие в (23 в), после соответствующих преобразований и интегрирования могут быть вычислены точно

$$f_n(\tilde{E}) = (-1)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{\tilde{E}^2 - 1}} [\tilde{E} + \sqrt{\tilde{E}^2 - 1}]^n = F_n^{(1)}(\tilde{E}) - F_n^{(2)}(\tilde{E}) G(\tilde{E}), \quad (24а)$$

где  $F_n^{(1)}(\tilde{E})$  и  $F_n^{(2)}(\tilde{E})$  — многочлены  $(n-1)$ -й и  $n$ -й степени по  $\tilde{E}$ , и функция Грина  $G(\tilde{E})$  равны

$$F_n^{(1)}(\tilde{E}) = (-1)^{n+1} \sum_{m=0}^{l_n} C_n^{2m+1} (\tilde{E}^2 - 1)^m \tilde{E}^{n-2m-1},$$

$$F_n^{(2)}(\tilde{E}) = (-1)^{n+1} \sum_{m=0}^{l_n} C_n^{2m} (\tilde{E}^2 - 1)^m \tilde{E}^{n-2m},$$

$$l_n = \text{entier} [(n-1)/2], \quad l_n = \text{entier} (n/2), \quad (24б)$$

$$G(\tilde{E}) = \text{sgn}(\tilde{E})/\sqrt{\tilde{E}^2 - 1}. \quad (24в)$$

С использованием (24) в уравнении (23в), из которого определяется энергия бифонана, может быть выделена линейная по  $G(\tilde{E})$  составляющая в левой части и, следовательно, уравнение (23в) может быть представлено в следующем виде:  
 $G(E) =$

$$= \frac{4\tilde{A}_M F_M^{(1)}(\tilde{E}) + \frac{1}{2} D_{M-1}^{-1}(\tilde{E}) [4\tilde{A}_{M-1} F_{M-1}^{(1)}(\tilde{E}) + \dots + D_0^{-1}(\tilde{E})] \dots}{4\tilde{A}_M F_M^{(2)}(\tilde{E}) + \frac{1}{2} D_{M-1}^{-1}(\tilde{E}) [4\tilde{A}_{M-1} F_{M-1}^{(2)}(\tilde{E}) + \dots - D_0^{-1}(\tilde{E}) 2\tilde{A}_0] \dots} \quad (25)$$

Отметим, что представление решения (23)—(25) с использованием (14)—(17) весьма удобно для численного расчета спектра связанных многофононных колебаний на ЭВМ, поскольку эти соотношения непосредственно представляют относительно простой алгоритм вычислений.

Используя найденное выше точное решение, рассмотрим особенности спектра бифононов в кристаллах, в которых вследствие различного характера убывания последовательности  $A_n$  величина  $M=0, 1, 2$ . С целью выяснения принципиальных моментов исследуем бифононы с  $K=0$ , непосредственно проявляющиеся, в частности, в оптических ИК спектрах. Из точного аналитического решения уравнения (18б) ( $M=0$ ) следует [3-7], что в одномерном кристалле терм связанного бифонана  $E = E_1$  отщепляется в низкочастотную сторону от низкочастотного края зоны диссоциированных двухфононных состояний  $P+P$  ( $2E_0 - 4V < E < 2E_0 + 4V$ ) при сколь угодно малом  $A_0 > 0$  и энергия этого бифонана  $E_1 = 2E_0 - \sqrt{(2A_0)^2 + (4V)^2}$ . Уравнение (19б), представленное в виде (25) при  $M=1$ , имеет следующий вид:

$$G(\tilde{E}) = \frac{4\tilde{A}_1(2\tilde{A}_0 + \tilde{E}) - 1}{4\tilde{A}_1\tilde{E}(2\tilde{A}_0 + \tilde{E}) + 2\tilde{A}_0} \quad (26)$$

Анализ этого уравнения при учете (24в) показывает, что в этом случае от  $P+P$  зоны отщепляются два терма бифононов — первый низкочастотный ( $BP$ )  $E = E_1$ , генетически связанный с константой  $A_0$ , и второй высокочастотный ( $BP^*$ )  $E = E_2$  отщепляется от  $P+P$  при  $A_0 > 4V$  при превышении константой  $A_1 > 0$  некоторого порога  $A_1^{(0)}$  ( $A_1 > A_1^{(0)}$ ). Величина этого порога  $A_1^{(0)}$  определяется из условия обращения в нуль знаменателя в правой части (26) при  $E = -1$ , т. е. на низкочастотном краю  $P+P$

$$A_1^{(0)} = V \cos(Ka/2) [1 - (V/A_0)]^{-1}. \quad (27)$$

Энергия высокочастотного  $BP^*$  бифонана  $E_2$  при малом отщеплении от  $P+P$ , т. е. при соответственно малой величине знаменателя  $G(\tilde{E})$  (24в) в левой части (26), равна



$$E_2 = E_0 - \left[ 4V + 2 \frac{(A_1 - A_1^{(0)})^2}{V} \right] \cos \left( \frac{Ka}{2} \right). \quad (28)$$

Уравнение (21в), представленное в виде (25) при  $M=2$ , имеет следующий вид:

$$G(\tilde{E}) = \frac{8\tilde{A}_2\tilde{E} [1 - 2(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)(\tilde{E} + 2\tilde{A}_1)] - 4\tilde{A}_1(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0) + 1}{4\tilde{A}_2(2\tilde{E}^2 - 1) [1 - 2(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0)(\tilde{E} + 2\tilde{A}_1)] - 4\tilde{A}_1\tilde{E}(\tilde{E} + 2\tilde{A}_0) - 2\tilde{A}_0} \quad (29)$$

Анализ этого уравнения показывает, что в этом случае при  $A_0 > 4V$ ,  $A_1 > A_1^{(0)}$  и при превышении  $A_2$  порога  $A_2^{(0)}$  ( $A_2 > A_2^{(0)}$ ) от низкочастотной границы  $P+P$  отщепляются три терма бифононов — низкочастотные ( $BP$ )  $E = E_1$ , ( $BP_1^*$ )  $E = E_2$ , генетически связанные с константами  $A_0$ ,  $A_1$ , и третий терм ( $BP_2^*$ )  $E = E_3$ , связанный с наличием  $A_2 > A_2^{(0)}$ . Величина порога  $A_2^{(0)}$  по-прежнему определяется из условия обращения в нуль знаменателя в правой части (29) при  $\tilde{E} = -1$

$$A_2^{(0)} = V \frac{[1 - (2V/A_0) - (V/A_1)] \cos(Ka/2)}{[1 - (2V/A_0) - (2V/A_1) + (2V^2/A_0A_1)]} \quad (30)$$

Энергия высокочастотного бифонона  $E_3$  при малом отщеплении от  $P+P$  определяется из (29) при учете (24в)

$$E_3 = E_0 - 2V \left[ 2 + \left( \frac{A_2 - A_2^{(0)}}{A_2^{(0)}} \right)^2 \right] \cos(Ka/2). \quad (31)$$

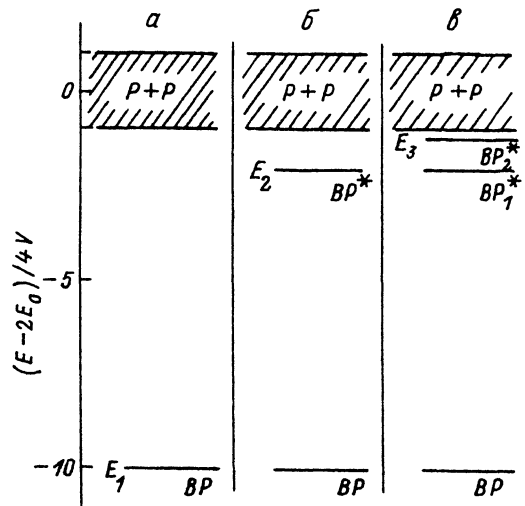
Анализ координатной зависимости соответствующих волновых функций с использованием (11) показывает, что волновая функция относительного движения  $\varphi_{n-m}$ , отвечающая состоянию с энергией  $E_1$ , имеет максимум при  $n = m$ , с энергией  $E_2$  — при  $n = m \pm 1$  и с энергией  $E_3$  — при  $n = m \pm 2$ . Таким образом, система термов и соответствующих волновых функций качественно напоминает систематику одномерного «водородоподобного атома», исследованного, в частности, в работе Мэррифила [10] применительно к электронно-дырочным парам в одномерном кристалле, но, в отличие от рассмотренного выше, с фиксированным кулоновским взаимодействием и при использовании континуального приближения.

На рис. 1 приведены результаты численного расчета спектра бифононов. На рис. 1, а представлена схема уровней двухфононных колебаний  $P+P$  и терм  $BP$  бифонона  $E_1$ , полученный аналитическим решением (18б) при  $A_0/4V = 5$ ; на рис. 1, б — два терма  $BP$ ,  $BP^*$  бифононов  $E_1$  и

рис. 1. Развитие серии бифононных термов при учете пространственной зависимости фонононного взаимодействия.

Рис. 1. Развитие серии бифононных термов при учете пространственной зависимости фонононного взаимодействия.

Пояснения см. в тексте. То же для рис. 2.



$E_2$ , полученные численным решением (26) при  $A_0/4V=5$ ,  $A_1/4V=1$ ; на рис. 1,  $\alpha$  — три  $BP$ ,  $BP_1^*$ ,  $BP_2^*$  терма  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ , полученные численным решением (29) при  $A_0/4V=5$ ,  $A_1/4V=1$ ,  $A_2/4V=0.7$ . Отметим, что существующее смещение термов  $E_1$  и  $E_2$  при переходе от рис. 1,  $\alpha$  к  $\beta$  и  $\gamma$  графически не проявляется вследствие выбранного масштаба. Вполне очевидно, что учет дальнейших членов в последовательности  $A_n$  (5) приведет (конечно, при определенных условиях на вид зависимости  $A_n$ ) к развитию целой серии термов возбужденных состояний бифононов со сгущением высокочастотных термов, проявляющимся уже на рис. 1. Все термы этой серии  $E_m$  могут быть найдены численным решением уравнения (25).

Аналогичным образом найдем спектр связанных трехфононных колебаний в кристаллах с гамильтонианом (1), (4), (5). Решение уравнения Шредингера  $\hat{H}|3\rangle = E|3\rangle$  можно найти в виде

$$|3\rangle = \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{B}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{B}_{\mathbf{k}_2}^+ \hat{B}_{\mathbf{K}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} |0\rangle, \quad (32)$$

где  $E$  — энергия и  $\psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  — волновая функция трифонона с полным волновым вектором  $\mathbf{K}$ . Подстановкой (32) в уравнение Шредингера с последующим использованием соответствующих коммутационных соотношений можно показать, что энергия и волновая функция трифонона определяются как решения уравнения

$$\begin{aligned} (E - E_{\mathbf{k}_1} - E_{\mathbf{k}_2} - E_{\mathbf{K}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}) \psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \\ = -2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} A(\mathbf{q}) [\psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_2) + \psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) + \\ + \psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})]. \end{aligned} \quad (33)$$

В ранее использованном приближении  $[\text{3-7}]$  при  $A(\mathbf{q}) = A_0$  система  $N^2 \times N^2$  уравнений (33) сводится к системе  $N \times N$  уравнений для суперпозиции функций  $\psi_{\mathbf{K}}^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  — сумме по одному из волновых векторов  $\mathbf{k}_1$  или  $\mathbf{k}_2$ . Соответствующее уравнение решалось аналитически и численно  $[\text{5}]$ . При учете зависимости  $A(\mathbf{q})$  такое упрощение не удастся произвести вследствие сложности ядра интегрального уравнения (33), и поэтому было проведено только численное решение (33). Как и в  $[\text{5}]$ , решалась соответствующая обратная задача, т. е. предполагалось, что энергия связанных трифононов  $E$  фиксирована и определялся «спектр» значений константы ангармонизма  $A_0$ , удовлетворяющих системе уравнений (33) при фиксированных значениях величин  $d_n = A_n/A_0$ . В соответствии с (9) зависимость  $A(\mathbf{q})$  имеет вид

$$A(\mathbf{q}) = A_0 d(\mathbf{q}), \quad d(\mathbf{q}) = \sum_{n=0} d_n (2 - \delta_{n,0}) \cos(qna), \quad d_0 = 1. \quad (34)$$

При этом уравнение (33) может быть представлено следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2A_0} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -G_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{K}, E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} d(\mathbf{q}) [\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_2) + \\ + \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) + \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})]. \end{aligned} \quad (35a)$$

Здесь трехчастичная функция Грина

$$G_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{K}, E) \equiv (E - E_{\mathbf{k}_1} - E_{\mathbf{k}_2} - E_{\mathbf{K}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2})^{-1}. \quad (35b)$$

Таким образом, при фиксированных  $E$  и  $d_n$  соответствующей диагонализацией  $N^2 \times N^2$  матрицы в правой части (35a) может быть определен «спектр» величин

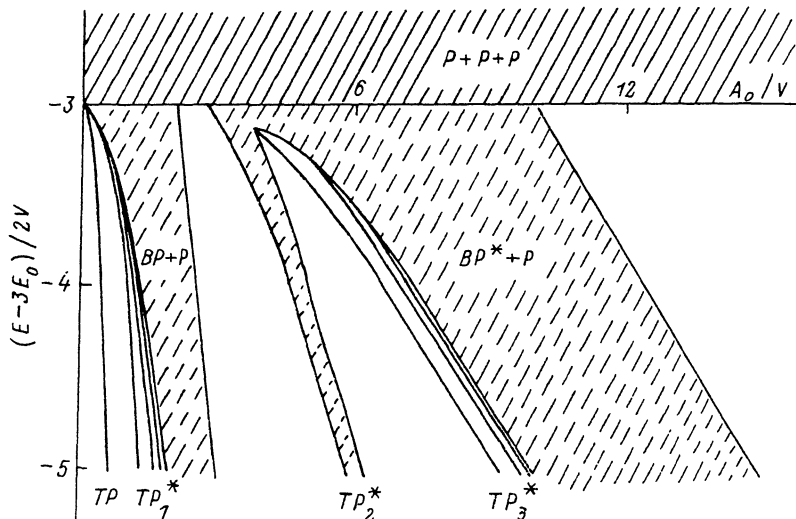


Рис. 2. Зависимость спектра трехфононных колебаний от константы ангармонизма  $A_0$  при учете пространственной зависимости фонон-фононного взаимодействия.

$1/2 A_0$ , а следовательно, и  $A_0$ . С целью выяснения принципиальных особенностей спектра трифононов решение (35) на ЭВМ ЕС-1066 было получено при фиксированных  $d_1 = 0.2$ ,  $d_n = 0$ ,  $n \geq 2$ ,  $N = 16$  для проявляющихся в оптических ИК-спектрах трифононов с нулевым полным волновым вектором  $K = 0$ .

На рис. 2 представлена зависимость спектра трехфононных колебаний от константы ангармонизма  $A_0$ , полученная с помощью указанной выше процедуры решения обратной задачи. Поскольку в расчетах принято  $A_1 = 0.2 A_0$ ,  $A_n = 0$ ,  $n \geq 2$ , в соответствии с рис. 1, б существует 2 термина бифононов — основной  $E_1(BP)$  и возбужденный  $E_2(BP^*)$ . Соответственно на рис. 2 наблюдаются четко выраженные полосы диссоциированных трехфононных состояний  $P + P + P$ ,  $BP + P$ ,  $BP^* + P$ . Асимптотические границы  $BP + P$  полосы при сильном ангармонизме  $E_{BP+P}^{1,2} = 2E_0 - 2A_0 \pm 2V$  [5], границы  $BP^* + P$ , как это можно показать из более детального анализа (25),  $E_{BP^*+P}^{1,2} = 2E_0 - 2d_1 A_0 \pm 2V$ . Термы связанных трехфононных колебаний наблюдаются, во-первых, с низкочастотной стороны от полосы  $BP + P$  — терм основного состояния  $TP$  и 4 термина возбужденных трифононов  $TP_1^*$ . Отметим, что в [5] при  $A_n = A_0 \delta_{n,0}$  наблюдался только один терм  $TP$  и один терм  $TP^*$  в этой области, т. е. удвоение числа бифононных термов (рис. 1, б) приводит к увеличению числа термов трифононов с 2 до 5.

Как это видно из рис. 2, в области спектра между  $BP + P$  и  $BP^* + P$  полосами присутствует четко выделенная полоса связанных трифононов  $TP_2^*$ . Асимптотическая зависимость энергии этих трифононов  $TP_2^*$  от  $A_0$  при сильном ангармонизме ( $A_0 > 2V$ ) линейна  $E_{TP_2^*} = -4d_1 A_0$ . Аналитическое решение уравнения (35) в этом пределе, когда можно пренебречь зависимостью входящей в ядро уравнения функции Грина  $G$  от волновых векторов, показывает, что соответствующие волновые функции  $\psi_0(k_1, k_2)$  трифононов  $TP_2^*$  с такой энергией имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_0(k_1, k_2) = & \cos [(k_1 - k_2) a] + \cos [(2k_1 + k_2) a] + \\ & + \cos [(2k_2 + k_1) a]. \end{aligned} \quad (36)$$

В соответствующем (36) координатном представлении собственные функции  $\Psi_{nmp}$  имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{nmp} &= \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, k_2} \psi_0(k_1, k_2) \exp \{ ia [k_1(n-p) + k_2(m-p)] \} = \\ &= \delta_{n+1, p} \delta_{m-1, p} + \delta_{n-1, p} \delta_{m+1, p} + \delta_{n+2, p} \delta_{m+1, p} + \delta_{n-2, p} \delta_{m-1, p} + \\ &\quad + \delta_{n+1, p} \delta_{m+2, p} + \delta_{n-1, p} \delta_{m-2, p}. \end{aligned} \quad (37)$$

Таким образом, в физическом смысле эти решения отвечают локализации трех возбуждений связанного комплекса на трех соседних различных узлах решетки, в отличие от трифононов  $TP_1^*$  при  $d_1 = 0$ , которые отвечают локализации двух возбуждений на одном узле и третьего возбуждения связанного комплекса на соседнем узле [5]. Ширина полосы  $TP_2^*$  трифононов существенно меньше ширины полос  $BP + P$  и  $BP^* + P$  и, как показывают дополнительные вычисления, эта ширина стремится к нулю при  $d_1 \rightarrow 0$ . При этом вся полоса  $TP_2^*$  смещается вслед за  $BP^* + P$  полосой в область больших  $A_0$ . Наоборот, при увеличении  $d_1$  полоса  $TP_2^*$  уширяется, смещается в сторону  $BP + P$  полосы и при некотором критическом  $d_1 \approx 0.4$  сливается с этой полосой. Таким образом, очевидно, что дисперсионная зависимость энергии этих состояний от волнового вектора определяется в основном только константой  $d_1$ . Это, естественно, связано с заменой дельтаобразного контактного взаимодействия на потенциальную яму определенной ширины при введении такой константы  $d_1$ . Более детальный анализ этих принципиально новых связанных состояний трифононов предполагается в дальнейшем. Наконец, на рис. 2 видно, что от низкочастотного края  $BP^* + P$  полосы отщеплены несколько термов  $TP_3^*$  связанных трифононов.

Отметим, что наличие термов связанных трифононов с энергией, большей, чем верхняя граница  $BP + P$  полосы (при  $d_1 = 0$  [5]), трифононов  $TP_2^*$ ,  $TP_3^*$  в области между  $BP + P$  и  $BP^* + P$  полосами принципиально связано с зонным характером возбуждений в кристаллической системе. В системе трех взаимодействующих частиц в вакууме такие состояния невозможны, поскольку верхняя граница аналога  $BP + P$  зоны смещается в область  $A_0 \rightarrow \infty$ . Соответственно в этом случае существует единственная «ефимовская» [5] точка сгущения термов связанных трехчастичных состояний с низкоэнергетической стороны от аналога  $BP + P$  полосы. В рассматриваемом нами случае существуют уже две области сгущения термов связанных трифононов — при  $E \leq 2E_0 - 6V$  вблизи  $BP + P$  полосы с ее низкочастотной стороны, и между  $BP + P$  и  $BP^* + P$  полосами. Очевидно, при отличных от нуля константах  $d_2, d_3, \dots$  возможно наличие и большего числа таких областей сгущения термов между также возрастающим числом полос диссоциированных состояний типа  $BP^* + P$ . В трехмерных кристаллах, в отличие от одномерных и двумерных, спектр связанных трифононов модифицируется [5] и, в частности, термы основного состояния  $TP$  и возбужденных состояний  $TP^*$  отщепляются от  $P + P + P$  полосы при отличной от нуля константе ангармонизма. Однако, по-видимому, и в этом случае возможно существование двух и более точек или областей сгущения термов и полос связанных трифононов.

Отметим, что развитая теория может представлять интерес при исследовании связанных четырехфононных [11] и пятифононных [12] комплексов.

В заключение авторы считают своим долгом выразить признательность В. М. Аграновичу за полезные замечания.

## Список литературы

- [1] Bini R., Salvi P. R., Schettino V., Jodl H.-J. // *Phys. Lett. A*. 1991. V. 157. N 4, 5. P. 273—282.
- [2] Kolesnikov A. I., Prager M., Tomkinson J., Bashkin I. O., Malyshev V. Yu., Ponyatovskii E. G. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1991. V. 3. N 5. P. 5927—5936.
- [3] Agranovich V. M. // *Spectroscopy and Excitation Dynamics of Condensed Molecular Systems* / Ed. V. M. Agranovich, R. M. Hochstrasser. Amsterdam: North-Holland, 1988. P. 183—185.
- [4] Агранович В. М., Лалов И. Й. // *УФН*. 1985. Т. 146. № 2. С. 267—302.
- [5] Agranovich V. M., Dubovsky O. A., Orlov A. V. // *Phys. Lett. A*. 1986. V. 119. N 2. P. 83—88.
- [6] Agranovich V. M., Dubovsky O. A. // *Optical Properties of Mixed Crystals* / Ed. R. J. Elliott, I. P. Ipatova. Amsterdam: North-Holland, 1988. P. 297—398.
- [7] Agranovich V. M., Dubovsky O. A., Orlov A. V. // *Sol. St. Commun.* 1989. V. 70. N 6. P. 675—681.
- [8] Efimov V. // *Phys. Lett.* 1970. V. 33. N 5. P. 563—571.
- [9] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. М.: Физматгиз, 1962. 443 с.
- [10] Merrifield R. E. // *J. Chem. Phys.* 1961. V. 34. N 2. P. 1835—1841.
- [11] Agranovich V. M., Dubovsky O. A., Orlov A. V. // *Sol. St. Commun.* 1989. V. 72. N 5. P. 491—496.
- [12] Дубовский О. А., Орлов А. В. // *ФТТ*. 1990. Т. 32. № 8. С. 2407—2413.

Физико-энергетический институт  
Обнинск

Поступило в Редакцию  
1 июля 1992 г.