

УДК 539.219.3

КИНЕТИКА МОДЕЛИ РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

В. Е. Зубкус, С. Р. Лапинкас

Исследованы процессы переноса в модели KDP решеточного газа в неупорядоченной фазе. Взаимодействия между парами первых и вторых ближайших соседей выбраны конкурирующими разных знаков. Методом кластеров вычислены коэффициенты самодиффузии и электропроводности. Получены их концентрационные и температурные зависимости. Для треугольной решетки указаны соотношения между коэффициентами диффузии меченых атомов и самодиффузии. В рамках развитой теории проведено качественное обсуждение опытных данных.

Модель решеточного газа, каждый узел которой занят частицей или пуст, широко используется при описании термодинамики фазовых переходов в сплавах внедрения и замещения [1-3], суперионных проводниках [4, 5], клатратных соединениях включения [6], монопленках, адсорбированных на твердых подложках [7, 8].

Согласно результатам этих и других исследований (см., например, [9]), в перечисленных соединениях имеется сочетание сильных короткодействующих со слабыми дальнедействующими корреляциями в расположении таких частиц. Парные потенциалы взаимодействия V_k между частицами (k — номер координационной сферы) с ростом k обычно осциллируют, а величины $|V_k|/T \geq 3 \div 4$, где T — характерные температуры в нескольких ближайших сферах.

Наличие сильных короткодействующих корреляций ($\exp(\beta |V_k|) \gg 1$) с конкурирующими (знакопеременными) взаимодействиями приводит к тому, что простейшее приближение среднего поля становится непригодным для описания свойств таких систем. Поэтому в этих случаях при исследовании термодинамики фазовых переходов используют хорошо зарекомендовавшее себя кластерное приближение [9]. В рамках этого приближения построены количественные теории термодинамических свойств многих соединений [3, 5-9].

Иным образом дело обстоит с описанием кинетических явлений в системах, где короткодействующие силы играют определяющую роль. В теоретических работах по исследованию процессов диффузии и электропроводности в реальных системах обычно исходят из модели решеточного газа с парными взаимодействиями между ближайшими соседями. Это работы группы Кикучи [10, 11] по диффузии меченых атомов в металлических бинарных сплавах. Расчеты [11] коэффициента диффузии $D_{\text{м}}$ проводились в приближении Бете—Пайерлса. Другая группа работ [12, 13] относится к вычислению D в системе адсорбированных атомов на твердой подложке. В них изучались процессы самодиффузии, но также учитывались взаимодействия в первой координационной сфере в квазихимическом κ Бете—Пайерлса приближениях. Отметим также большую серию статей по исследованию процесса диффузии численным методом Монте-Карло (см., например, [14]).

Однако, оставаясь в рамках приближения типа Бете—Пайерлса, трудно корректно учесть взаимодействия в более чем одной координа-

дионной сфере даже в статистике [3, 9]. В динамике эти трудности соответственно возрастают.

В настоящей работе предложен метод расчета коэффициентов диффузии и электропроводности в системах с сильными короткодействующими и слабыми дальнедействующими корреляциями в расположении мигрирующих частиц. Вычисления проведены в рамках модели решеточного газа в неупорядоченной однородной фазе. Учет корреляций осуществлен методом кластеров.

1. Выражения для коэффициентов диффузии и электропроводности

Выберем решетку KDP (рис. 1), узлы которой могут быть либо пустыми ($n_i=0$), либо заполненными ($n_i=1$). Эта решетка является классическим примером системы с сильно конкурирующими короткодействующими взаимодействиями разных знаков. Она используется при моделировании упорядочения протонов в суперионных проводниках MeHSO_4 с $\text{Me}=\text{Cs, Rb, NH}_4$ [5].

Будем исходить из двумерного уравнения диффузии

$$c = \text{div}(D_{\alpha\beta} \text{grad} c), \quad (1)$$

где индексы $\alpha, \beta=x, y$.

Введем средние значения $\langle n_i \rangle = c_i$ — концентрации частиц в узлах i . Пусть вблизи узла 1 создана максимальная (или минимальная) концентрация в решетке. Если в узлах $i=2-7$ изменения концентрации невелики, то

$$c_i(x, y) = c_1(x, y) + \Delta c_i(x, y), \quad (2)$$

где $\Delta c_i \ll c_1$. Скорость изменения c_1

$$\dot{c}_1 = \sum_{i=2}^7 (J_{i1} - J_{1i}). \quad (3)$$

Здесь J_{ij} — поток частиц из узла i в узел j . Будем считать в соответствии с работами [10-12], что J_{ij} определяется через среднее число перескоков частиц из узла i в узел j

$$J_{ij} = \langle v_{ij} n_i (1 - n_j) \rangle, \quad (4)$$

где v_{ij} — частота перескоков частиц из занятого узла i в свободный узел j . Поскольку процессы диффузии в рассматриваемых соединениях чаще всего носят активационный характер, то предполагается, что

$$v_{ij} = v_0 \exp(-\beta E_0) \exp(\beta h_{ij}), \quad (5)$$

где h_{ij} — эффективные поля, действующие на частицу в узле i со стороны частиц, окружающих узел i ; v_0 — частота перескоков частиц в отсутствие взаимодействий; E_0 — величина энергетического барьера, который необходимо преодолеть частице; $\beta=1/T$.

Подсчитаем потоки частиц в приближении двух 2-частичных кластеров, каждый из которых включает постоянную V или U , и 4-частичном кластере, учитывающем одновременно обе постоянные V и U . Гамильтонианы этих кластеров приводились неоднократно (см., например, [9, 15]), и поэтому мы их здесь выписывать не будем. Отметим лишь, что при наличии диффузии все узлы решетки становятся неэквивалентными и каждый

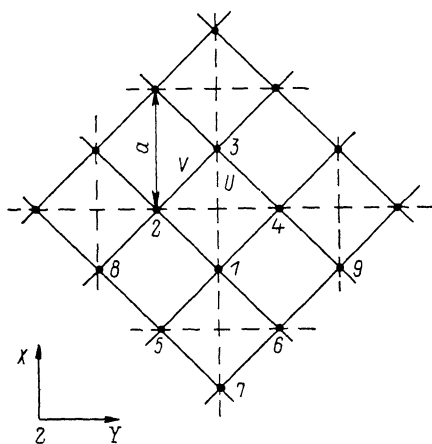


Рис. 1. Проекция решетки KDP на плоскость x, y .

«полевой» член в кластерных гамильтонианах войдет со своим значением эффективного поля.

а) Приближение 2-кластеров. Потоки частиц из узла 2 в узел 1 (и наоборот), согласно (4), (5), определяются как

$$J_{21} = \langle v_{21} n_2 (1 - n_1) \rangle = v \exp(\beta \bar{\varphi}_2) \langle n_2 (1 - n_1) \rangle, \quad (6a)$$

$$J_{12} = \langle v_{12} n_1 (1 - n_2) \rangle = v \exp(\beta \bar{\varphi}_1) \langle n_1 (1 - n_2) \rangle, \quad (6b)$$

$$\bar{\varphi}_{1,2} = \psi_{1,2} + \gamma c_{1,2}, \quad v = v_0 \exp(-\beta E_0).$$

Усреднение в (6) следует выполнить с кластерной матрицей плотности $\rho_2 = \exp(-\beta H_2) / \text{Sp} \exp(-\beta H_2)$, где H_2 — гамильтониан 2-кластера, включающий константу V ; $\psi_{1,2}$ — эффективные поля, описывающие действие ближайших соседей; постоянная γ учитывает взаимодействия с ближайшими соседями в приближении молекулярного поля.

Проводя усреднение, получаем

$$J_{21} = v Z_{21}^{-1} \exp(\beta \mu_1), \quad J_{12} = v Z_{21}^{-1} \exp(\beta \mu_2). \quad (7)$$

Здесь $Z_{21} = \text{Sp} \exp(-\beta H_2)$ — статистическая сумма, μ_i — химический потенциал частиц в узле i .

Предположим, что в результате транспорта частиц по решетке отклонения от термодинамического равновесия не столь велики

$$\psi_i = \psi_0 + \Delta \psi_i, \quad \mu_i = \mu_0 + \Delta \mu_i, \quad (8)$$

где $\Delta \psi_i \ll \psi_0$; $\Delta \mu_i \ll \mu_0$; ψ_0, μ_0 — эффективное поле и химический потенциал в условиях термодинамического равновесия. Подставляя тогда (3) и (8) в (7), получаем с точностью до линейных по $\Delta c_2 = c_2 - c_1$ членов

$$\Delta J_{12} = J_{21} - J_{12} = v (Z_{21}^0)^{-1} \exp(\beta \mu_0) \frac{\partial (\beta \mu_0)}{\partial c} \Delta c_2, \quad (9)$$

где величина Z_{21}^0 — статистическая сумма Z_{21} в равновесии, а химический потенциал μ_0 выражается через c обычным образом [3, 8].

Вычисляя оставшиеся ΔJ_{ij} и подставляя их в (3), получаем

$$\dot{c} = v \exp(\beta \mu_0) \frac{\partial (\beta \mu_0)}{\partial c} [(Z_{21}^0)^{-1} (\Delta c_2 + \Delta c_4 + \Delta c_5 + \Delta c_6) + (Z_{22}^0)^{-1} (\Delta c_3 + \Delta c_7)], \quad (10)$$

где $Z_{22}^0 = \text{Sp} \exp(-\beta H'_2)$; H'_2 — гамильтониан 2-кластера, включающий постоянную U .

Если представить отклонения Δc_i в виде

$$\Delta c_i = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} (\Delta x)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} (\Delta y)^2 + \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} \Delta x \Delta y \quad (11)$$

и поставить (11) в (10), то мы придем к уравнению диффузии (1) с коэффициентом

$$D = \frac{a^2 v}{2} \exp(\beta \mu_0) \frac{\partial (\beta \mu_0)}{\partial c} [(Z_{21}^0)^{-1} + (Z_{22}^0)^{-1}], \quad (12)$$

Чтобы найти коэффициент электропроводности σ , следует воспользоваться общим соотношением Эйнштейна

$$\sigma = e^2 D (\partial \mu / \partial c)^{-1}, \quad (13)$$

где e — заряд движущейся частицы и D определен в (12).

Сравним результаты наших вычислений с [10-13, 16]. Для этой цели положим в выражениях (12), (13) $U=0$. Тогда решетка превращается в квадратную решетку со взаимодействием ближайших соседей. Если также положить $\gamma=0$, то формула (12) перейдет в D , найденное в [12, 13, 16] в приближениях Бете-Пайерлса и квазихимическом. При $V=U=0$, но $\gamma \neq 0$ (12) переходит в соответствующее выражение работы [13].

Кикучи с соавторами [10, 11] рассматривали треугольную решетку со взаимодействием ближайших соседей. Мы вычислили нашим методом D и c в такой решетке. В результате оказалось, что наше выражение для c совпадает с [10, 11]. Поскольку в [10, 11] исследовались процессы диффузии меченых атомов, то наше D и коэффициент диффузии D_* меченых атомов отличаются друг от друга. Однако это позволяет получить фактор корреляции $f = D_*/D$ в треугольной решетке.

На рис. 2 приведена концентрационная зависимость при различных значениях температуры $t = T/|V|$. Выбраны случаи отталкивания ($V > 0$) и притяжения ($V < 0$) частиц. При $V < 0$ система может расслаиваться на две фазы: жидкую и газообразную ($T_s(c)$ — уравнение этой кривой). В случае $V > 0$ расслоения не происходит. Из рис. 2 видно, что значения коэффициентов D и D_* в треугольной решетке могут отличаться друг от друга в несколько раз, причем в некритической области $T \rightarrow T_s$. В то же время из феноменологического соотношения [2]

$$f = T(c_m - c) c_m^{-1} (T - T_s)^{-1}, \quad (14)$$

где c_m — максимальная концентрация, следует, что наиболее заметно D от D_* отличается в критической области $T \rightarrow T_s$ и $c \rightarrow c_m$ с линей-

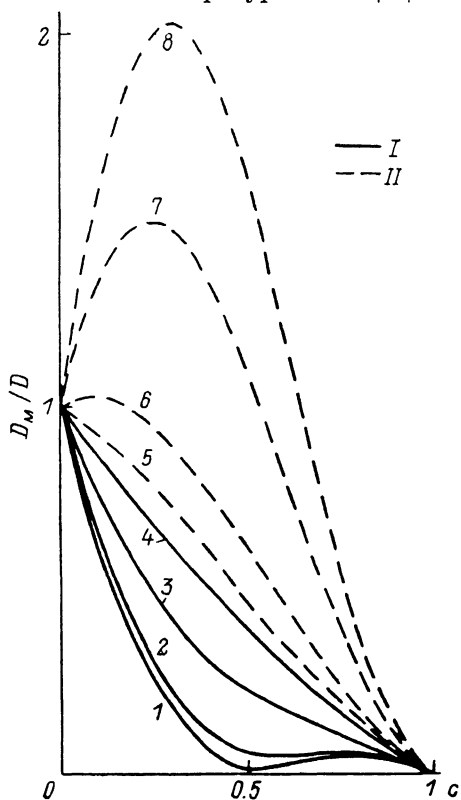


Рис. 2. Концентрационная зависимость фактора корреляции $f = D_*/D$ в треугольной решетке. $V > 0$ (I), $V < 0$ (II).

Значения t : 1 — 0.05, 2 — 0.1, 3 — 0.4, 4 — ∞ , 5 — 0.9, 6 — 0.46, 7 — 0.23, 8 — 0.18.

ной зависимостью f от $c - c_m$ и f^{-1} от $T - T_s$. Как видно из рис. 2, учет сил короткодействия значительно расширяет возможные случаи отклонения f от единицы.

б) Приближение 4-кластера. По-прежнему исходим из уравнения (3), но потоки $J_{i,j}$ будем вычислять в приближении 4-кластера. Поток частиц из узла 2 в узел 1 в этом приближении равен

$$J_{21} = v \exp \left[\beta \left(\frac{\psi_2}{2} + \gamma c_2 \right) \right] \langle \exp [\beta (V n_3 + U n_4)] n_2 (1 - n_1) \rangle = \\ = v \exp \left[\beta \left(\frac{\psi_2}{2} + \gamma c_2 \right) \right] \langle (1 - n_3 + n_3 K_1^{-1}) (1 - n_4 + n_4 K_2^{-1}) n_2 (1 - n_1) \rangle. \quad (15)$$

Здесь $K_1 = \exp(-\beta V)$, $K_2 = \exp(-\beta U)$, а усреднение в (15) надо проводить с матрицей плотности $\rho_4 = \exp(-\beta H_4) / \text{Sp} \exp(-\beta H_4)$, где H_4 — гамильтониан 4-кластера.

После вычислений, выполненных аналогично приближению 2-кластеров, приходим к выражению

$$D = a^2 v (Z_4^0)^{-1} \exp(\beta \mu_0) \frac{\partial (\beta \mu_0)}{\partial c} \left[1 + 2Y + \frac{Y^2}{2} (K_1 + K_2) \right]. \quad (16)$$

Здесь $Z_4^0 = \text{Sp} \exp(-\beta H_4^0)$ и зависимость $Y = \exp[\beta(\psi - \mu)]$ от концентрации c дается уравнением четвертой степени, полученным из условия

$c = \langle n \rangle_0$, где $\langle \dots \rangle_0$ означает усреднение с равновесной матрицей плотности ρ_4^0 .

2. Обсуждение результатов

Выберем конкурирующие взаимодействия двух типов: 1) $V < 0$, $U > 0$ — притяжение в первой и отталкивание во второй координационных сферах. Этот случай отвечает, видимо, протонным суперионным проводникам группы CSHSO_4 [5]; 2) $V > 0$, $U < 0$ — отталкивание в первой и притяжение во второй сферах. Этот случай может иметь место при хемосорбции атомов на твердых подложках [7, 8].

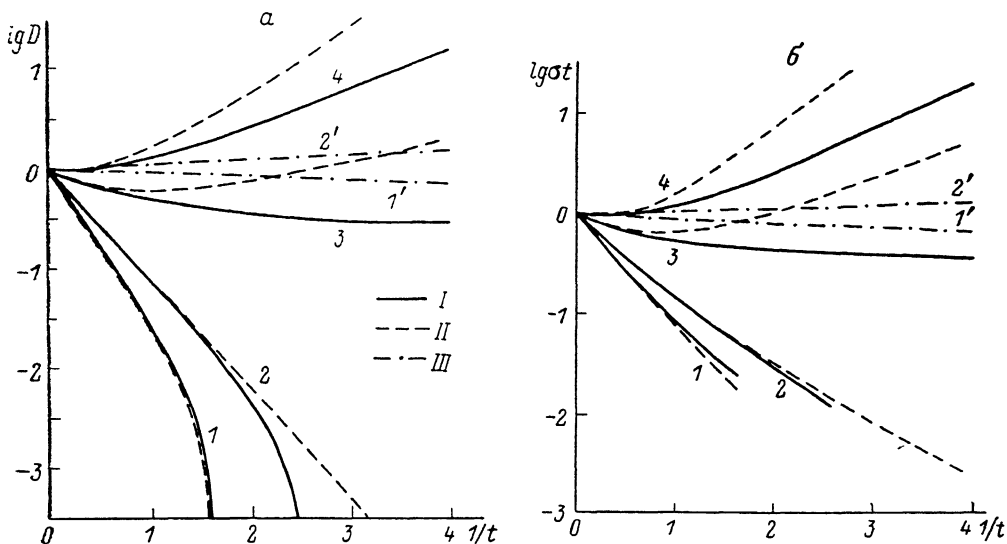


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициентов диффузии D (а) и электропроводности σ (б).

$c = 0.75$, $l = -1$. Значения α : 1 — 0, 2 — 0.5, 3 — 1.5, 4 — 2. I — 4-кластер, II — 2-кластеры, III — приближение МП, $\gamma_M = -0.1$ ($1'$) и 0.1 ($2'$).

Введем удобные для дальнейшего безразмерные параметры

$$t = T/|V|, \quad \alpha = U/|V|, \quad \gamma_M = \gamma/|V|, \quad l = V/|V|.$$

В модели решеточного газа возможен переход жидкость—газ. Чтобы получить кривую $t_0(c)$ этого перехода, следует приравнять химические и термодинамические потенциалы каждой фазы. В модели имеется также температура $t_k(c)$, ниже которой решеточная жидкость «кристаллизуется». Эту температуру мы определяли здесь из условия обращения в нуль энтропии $S = -\partial F/\partial T$. Зависимости, которые будут анализироваться ниже, в основном получены при температурах $t > t_0(c)$ и $t > t_k(c)$.

Исследуем, при каких T коэффициенты $D(T, c)$ и $\sigma(T, c)$ описываются аррениусовскими зависимостями

$$D_a(T, c) = D(T, c) D_0^{-1}(T) = \exp[-\beta E'_D(c)], \quad (17a)$$

$$\sigma_a(T, c) = T\sigma(T, c) \sigma_0^{-1}(T) = \exp[-\beta E'_\sigma(c)]. \quad (17b)$$

Здесь $D_0(T) = a^2 v_0 \exp(-\beta E_0)$, $\sigma_0(T) = e^2 D_0(T)$. Полные энергии активации E_D и E_σ складываются из двух слагаемых

$$E_D = E_0 + E'_D(c), \quad E_\sigma = E_0 + E'_\sigma(c). \quad (18)$$

В приближении молекулярного поля ($l = \alpha = 0$) зависимости (17) выполняются во всей области изменения температур. При взаимодействии ближайших соседей ($\alpha = 0$) и $l = -1$ энергии E_D и E'_σ положительные,

а D_a и σ_a слабо зависят от параметра $|\gamma_m| \ll 1$. Результаты приближений 2- и 4-кластеров качественно сходны между собой, но количественно отличаются на 5—7%. Отклонения от закона Аррениуса (17) начинаются при приближении к кривой расслоения фаз; у $\ln D_a$ в окрестности $t \rightarrow t_0(c)$ наблюдается сильная нелинейная зависимость от t^{-1} . Такое поведение $D_a(t)$ в отличие от $\sigma_a(t)$, где нет значительных изгибов вблизи $t_0(c)$, связано с тем, что величина $\partial \mu / \partial c$ при $t \rightarrow t_0$ уменьшается.

При $\alpha = 0$ и $l = 1$ энергии E'_D и E'_σ становятся отрицательными. В этом случае раньше, чем система расслоится на две фазы, наступает кристаллизация и $t_k > t_0$. Закон (17) выполняется здесь практически при всех t , но не очень малых c . Результаты 2- и 4-кластеров качественно сходны между собой.

По мере увеличения параметра «конкуренции» $|\alpha|$ поведение системы усложняется.

Выберем сначала $l = -1$. Пусть также $|\gamma_m| \ll 1$. С ростом α результаты приближений 2- и 4-кластеров начинают количественно расходиться более заметно, нежели в случае $\alpha = 0$, но в качественном отношении эти приближения дают сходные зависимости (рис. 3).

При $\epsilon = \alpha - 1 \leq 0$ закон Аррениуса (17) хорошо выполняется в широком температурном интервале только при малых c . С ростом c температурный интервал закона (17) сужается. Как только величина ϵ станет положительной

Рис. 4. Концентрационные зависимости коэффициента диффузии.

$l = -1$ (масштаб слева): 1 — $\alpha = 0$, 2 — 1, 3 — 2; $l = 1$ (масштаб справа): 4 — $\alpha = 0$, 5 — (-1), 6 — (-2), $t = 1$. Сплошные линии — 4-кластер, штриховые — 2-кластер.

и малой, на зависимостях $D_a(t)$ и $\sigma_a(t)$ начинают появляться перегибы (E'_D и E'_σ меняют знак). При $t \gg 1$ величины $E'_D, E'_\sigma > 0$, а при $t \ll 1$ энергии $E'_D, E'_\sigma < 0$. Если $\epsilon \geq 1$, то с ростом t коэффициенты D_a и σ_a (при не малых c) уменьшаются при всех t .

Пусть $l = 1$. При немалых c (обычно $c > 0.5$) закон (17) выполняется в широком температурном интервале с $E'_D, E'_\sigma < 0$. При малых c в области $t \gg 1$ величины $E'_D, E'_\sigma < 0$, а при $t \ll 1$ энергии $E'_D, E'_\sigma > 0$. С ростом $|\alpha|$ отклонения от закона Аррениуса возрастают (рис. 3, б).

Рассмотрим влияние параметра компенсации α на поведение $D_a(c)$ и $\sigma_a(c)$. Начнем со случая $l = -1$ и $\alpha > 0$, выбрав $|\gamma_m| \ll 1$. Предположим, что мы находимся вдали от особых точек $t_0(c)$ и $t_k(c)$. С ростом α и при увеличении c у $D_a(c)$ появляются сильные нелинейности, вплоть до возникновения на кривой $D_a(c)$ нескольких минимумов и максимумов (рис. 4). Особо сложное поведение $D_a(c)$, требующее безусловно отдельного рассмотрения, наблюдается при $t \rightarrow t_0$ или t_k . Здесь лишь отмечаем, что в этой области t коэффициент диффузии D_a может резко уменьшаться при приближении концентрации c к некоторым c_i . Например, при $\alpha = 1$ и $t = 0.36$ ($t_0^{\max}(c) = 0.35$) в 2-кластерах $D_a(c)$ резко уменьшается вблизи $c_1 \approx 0.1$ и $c_2 \approx 0.9$.

Пусть теперь α уменьшается от 0 до $-\alpha_0$ при $l = 1$. По сравнению со случаем $\alpha = 0$ рост $|\alpha|$ приводит к появлению у $D_a(c)$ областей максимума и минимума функции (рис. 4).

3. Заключение

Изложенная здесь теория имеет практический смысл, если E_0 не слишком превосходит E'_D и E'_σ . В указанных в начале статьи соединениях полная энергия E_D изменяется от 0.05 до 1.5 эВ. Поскольку энергия E_0 не зависит от c , то для оценок E'_D и E'_σ необходимы концентрационные

зависимости коэффициентов D и σ . Для ряда соединений эти данные имеются. В системе $\text{Nb} D_x$ отношение $\delta = E'_D/E_0 \approx 0.5$, в NbH_x $\delta \approx 0.6$ при половине заполнения Nb водородом и дейтерием [2]. Из экспериментальных данных по диффузии адсорбированных атомов Li и O на грани $\text{W}(110)$ [17, 18] можно видеть, что $\delta \approx 0.4-0.5$. В пользу важности учета сил короткодействия говорит также наличие разности энергий активации $\Delta E = E'_c - E'_D$. Например, в протонном суперионном проводнике RbHScO_4 разность $\Delta E \sim 1.5 \cdot 10^3 \text{ K}$, что превосходит температуру перехода в суперионное состояние более чем в три раза [19].

В литературе широко обсуждаются вопросы, связанные с отклонениями от закона Аррениуса (17а) (см., например, [20, 21]). Как следует из результатов наших исследований, эти отклонения в неупорядоченной фазе могут реально существовать, а их количественные характеристики зависят от близости расположения системы к двухфазной области и величин конкурирующих сил.

Сделаем несколько замечаний относительно точности приближений 2- и 4-кластеров. В отсутствие конкурирующих взаимодействий эти приближения мало отличаются друг от друга и расположены посередине между точными результатами (ЭВМ расчеты) и приближением молекулярного поля. При наличии сильных короткодействующих корреляций расчеты на ЭВМ коэффициентов $D(c, T)$ и $\sigma(c, T)$ нам неизвестны. Если, однако, общие тенденции кластерного приближения в кинетике не претерпят существенных изменений по сравнению со статистикой, то точность метода кластеров будет возрастать с уменьшением величины $\exp(-\beta|V_k|)$. Принимая сказанное, можно понять, почему в условиях сильных корреляций ($|\alpha| > 1$) приближений 2- и 4-кластеров расходятся значительно, чем при $\alpha = 0$. Действительно, 4-кластер является минимальным по своим размерам кластером, естественным образом отражающим геометрию решетки KDP . Поэтому его точность с увеличением $|\alpha|$ должна расти быстрее, чем 2-кластеров.

Еще одна проблема, затронутая в данной статье, относится к вычислению фактора корреляции f . Вопросы оценок этого фактора широко дискутируются в литературе (см. [22, 23] и там же ссылки). Трудности в интерпретации результатов вызывают случаи, когда f оказывается относительно большой величиной, $f \geq 50$ [23]. Однако из наших результатов следует, что f вполне может быть величиной такого и даже более высокого порядка вне критической области $t \rightarrow t_0$.

Авторы выражают глубокую благодарность В. Г. Ваксу и Н. М. Плакиде за полезные обсуждения и критические замечания. Мы также благодарны А. И. Баранову, А. В. Белушкину, И. П. Григасу, А. С. Орлюкасу, Л. В. Шувалову за помощь при ознакомлении с экспериментальными данными по диффузии и электропроводности.

Л и т е р а т у р а

- [1] Смирнов А. А. Теория сплавов внедрения. М.: Наука, 1979. 270 с.
- [2] Водород в металлах / Под ред. Г. Алефельда, И. Фелкля. М.: Мир, 1980, т. 1. 475 с.
- [3] Вакс В. Г., Зейн Н. Е., Зиненко В. И., Орлов В. Г. ЖЭТФ, 1984, т. 87, № 6 (12), с. 2030—2046.
- [4] Урбановичус В. В., Шнейдер В. Е., Григас И. П., Давидович Р. Л. ЖЭТФ, 1984, т. 83, № 1 (7), с. 275—283.
- [5] Плакида Н. М. Письма ЖЭТФ, 1985, т. 41, № 3, с. 95—96; *Plakida N. M. Phys. St. Sol. (b)*, 1986, vol. 135, N 1, p. 133—139.
- [6] *Schneider V. E., Tornau E. E., Vlasova A. A. J. Chem. Phys. Lett.*, 1982, vol. 93, N 3, p. 188—192.
- [7] *Caflish R. G., Berker A. N. Phys. Rev. B*, 1984, vol. 29, N 3, p. 1279—1286.
- [8] Зубкус В. Е., Власова А. А., Купцов С. А. Поверхность, 1988, № 5, с. 34—40.
- [9] Вакс В. Г., Зиненко В. И., Шнейдер В. Е. УФН, 1983, т. 141, № 4, с. 629—673.
- [10] *Kikuchi R. Progr. Theor. Phys. Suppl.*, 1966, N 35, p. 1—64.
- [11] *Sato H., Kikuchi R. J. Chem. Phys.*, 1971, vol. 55, N 2, p. 677—702; *Kikuchi R., Sato H. J. Chem. Phys.*, 1971, vol. 55, N 2, p. 702—715; *J. Chem. Phys.*, 1972, vol. 57, N 11, p. 4962—4979.

- [12] Тарасенко А. А., Чумак А. А. ФТТ, 1980, т. 22, № 10, с. 2939—2945; Поверхность, 1983, № 2, с. 35—43.
- [13] Жданов В. П. Поверхность, 1986, № 1, с. 14—22.
- [14] Gadiq A., Binder K. Surf. Sci., 1983, vol. 128, N 2, p. 350—361.
- [15] Горнау Э. Э., Шнейдер В. Е. ФТТ, 1982, т. 24, № 3, с. 724—732.
- [16] Bowker M., King D. A. Surf. Sci., 1978, vol. 71, N 3, p. 583—598.
- [17] Butz R., Wagner G. Surf. Sci., 1977, vol. 63, N 3, p. 448—453.
- [18] Naumovets A. G. Physics Reviews (Soviet Sci. Rev., Sect. A), 1984, vol. 5, N 1, p. 443—465.
- [19] Москвич Ю. М., Суховский А. А., Розанов О. В. ФТТ, 1984, т. 26, № 1, с. 38—44.
- [20] Okamoto M. A. Acta Met., 1983, vol. 31, N 8, p. 1169—1175.
- [21] Gillan M. J. J. Phys. C, 1986, vol. 19, N 31, p. 6169—6184.
- [22] Sato H., Ishikawa T., Kikuchi R. J. Phys. Chem. Solids, 1985, vol. 46, N 12, 1361—1370.
- [23] Dynamics of Molecular Crystals / Ed. J. Lascombe. Elsevier Publ., Amsterdam, 1987. 398 p.

Вильнюсский государственный
 университет им. В. Капсукаса
 Вильнюс

Поступило в Редакцию
 4 марта 1988 г.