

## ТРАНСФОРМАЦІЙНІ ОСОБЛИВОСТІ УЗАГАЛЬНЕНОЇ ДИНАМІЧНОЇ МАТРИЦІ СКЛАДНИХ КРИСТАЛІВ СІМЕЙСТВА $3(2a \times 2a \times 2a)$ – НАДГРАТКОЮ

І. М. ШКИРТА

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, вул.Волошина, 54

До сімейства складних кубічних кристалів з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою відносяться кристали *Cu*, *W*, *NaCl*, *CsCl*, *Cu<sub>3</sub>Au*, *BaTiO<sub>3</sub>*. Для їх опису зручно вибрати  $(3+3)$ -вимірний базис:

Прямий:	обернений
$A_1=(a,0,0,-b/2,0,0)$ ;	$a_1^*=(2\pi/a,0,0,0,0,0)$ ;
$A_2=(0,a,0,0,-b/2,0)$ ;	$a_2^*=(0,2\pi/a,0,0,0,0)$ ;
$A_3=(0,0,a,0,0,-b/2)$ ;	$a_3^*=(0,0,2\pi/a,0,0,0)$ ;
$A_4=(0,0,0,b,0,0)$ ;	$a_4^*=(\pi/a,0,0,2\pi/b,0,0)$ ;
$A_5=(0,0,0,0,b,0)$ ;	$a_5^*=(0,\pi/a,0,0,2\pi/b,0)$ ;
$A_6=(0,0,0,0,0,b)$	$a_6^*=(0,0,\pi/a,0,0,2\pi/b)$

Неважно бачити, що узагальнений базис визначається базовими векторами ПК-гратки у зовнішньому (позиційному) просторі  $V_E$  та аналогічними векторами у внутрішньому (фазовому) просторі  $V_d$ . Саме вибір ПК-базису протокристалла для вищезгаданих кристалів дає змогу генерувати 8 вузлів, що характерно для реальних кристалічних структур.

Всі можливі комбінації трьохвимірних компонент  $a_1^* - a_6^*$  утворюють множину векторів модуляції, які розпадаються на 4 зірки:

1.  $\{q_{000}\}$  ( $q_{000}=(0,0,0)$ ) - одновекторна;
2.  $\{q_{110}\}$  ( $q_{110}=(\pi/a, \pi/a, 0)$ ) - трьохвекторна;
3.  $\{q_{111}\}$  ( $q_{111}=(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ ) - одновекторна;
4.  $\{q_{100}\}$  ( $q_{100}=(\pi/a, 0, 0)$ ) - трьохвекторна.

Застосування концепції надпросторової симетрії до розгляду динаміки кристалічної гратки даного сімейства приводить до розв'язку матричного рівняння:

$$|D - \omega^2 F| = 0 \quad (1)$$

відносно значень  $\omega^2(k)$  [1].

Матриця  $D$  задається у вигляді суперпозиції динамічних матриць протокристалла, визначених у точках зони

Бриллюена, що пов'язані векторами модуляції і має вигляд:

$$D = \begin{pmatrix} D^1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D^4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D^5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D^6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D^7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D^8 \end{pmatrix} \quad (2),$$

де

$$\begin{aligned} D^1 &= D_{\alpha\beta}(k), D^2 = D_{\alpha\beta}(k - q_{110}), \\ D^3 &= D_{\alpha\beta}(k - q_{101}), \\ D^4 &= D_{\alpha\beta}(k - q_{011}), D^5 = D_{\alpha\beta}(k - q_{111}), \\ D^6 &= D_{\alpha\beta}(k - q_{100}), D^7 = D_{\alpha\beta}(k - q_{010}), \\ D^8 &= D_{\alpha\beta}(k - q_{001}). \end{aligned}$$

Матриця  $F$  визначається як матриця дефекту мас через амплітуди масових (окупаційних) модуляційних функцій і для даного сімейства має вигляд:

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes A + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes B, \quad (3)$$

де

$$A = \begin{pmatrix} \rho_1 & \rho_2 & \rho_2 & \rho_2 \\ \rho_2 & \rho_1 & \rho_2 & \rho_2 \\ \rho_2 & \rho_2 & \rho_1 & \rho_2 \\ \rho_2 & \rho_2 & \rho_2 & \rho_1 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} \rho_3 & \rho_4 & \rho_4 & \rho_4 \\ \rho_4 & \rho_3 & \rho_4 & \rho_4 \\ \rho_4 & \rho_4 & \rho_3 & \rho_4 \\ \rho_4 & \rho_4 & \rho_4 & \rho_3 \end{pmatrix},$$

причому індекс  $i$  в  $\rho_i$  відповідає номеру зірки.

Зведення секулярного рівняння (1) до задачі на власні значення проведемо згідно [2]. Для цього знаходимо матрицю подібності  $G$  таку, що

$$G^{-1}FG = \Omega^2,$$

де  $\Omega^2$ -діагональна матриця власних матриці  $F$  має вигляд:

$$\Omega^2 = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_3^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_4^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_4^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_4^2 \end{pmatrix}$$

Одна із можливостей знаходження матриці  $G$  полягає у визначенні власних значень і власних векторів матриці  $F$ , які мають вид:

$$[-\rho_4 + \rho_1 - \rho_3 - \rho_2, 3, \{[1, -1, 0, 0, 0, 1, -1, 0], [0, -1, 0, 1, 0, 1, 0, -1], [0, -1, 1, 0, 1, 1, 0, 0]\}],$$

$$[-\rho_4 + \rho_1 + \rho_3 - \rho_2, 3, \{[0, 0, -1, 1, -1, 0, 0, 1], [1, 0, -1, 0, -1, 0, 1, 0], [0, 1, -1, 0, -1, 1, 0, 0]\}],$$

$$[3\rho_4 + \rho_1 + \rho_3 + 3\rho_2, 1, \{[1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]\}],$$

$$[3\rho_4 + \rho_1 - \rho_3 - 3\rho_2, 1, \{[1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1]\}],$$

Тут цифрами 1 та 3 позначена кратність виродження розв'язку. Визначник (2) можна представити в дещо іншому еквівалентному вигляді, а саме:

$$|D' - \omega^2 [E \otimes F]| = 0,$$

де  $E$  – одинична матриця.

Скориставшись явним видом  $G$  можна задати загальний вигляд матриці подібності  $[E \otimes G]$  та  $[E \otimes G^{-1}]$ , які здійснюють перетворення

$$|D'' - \omega^2 [E \otimes \Omega^2]| = 0,$$

яка, в свою чергу, множенням рядків і стовпчиків на  $1/\sqrt{(\omega_i^2)}$  може бути

приведена до задачі на власні значення  $\tilde{D}''$ , що одержується шляхом перетворення

$$[E \otimes G^{-1}] \cdot D'' \cdot [E \otimes G] = \tilde{D}''$$

і тоді задача знаходження власних значень набуває вигляду:

$$|\tilde{D}'' - \omega^2 E| = 0.$$

Вісім позицій протокристалла для кубічної ґратки також розпадаються на 4

орбіти, які генеруються позиціями  $(0, 0, 0)$ ,  $(a, 0, 0)$ ,  $(a, a, 0)$ ,  $(a, a, a)$ .

Потужність можливих позицій і векторів модуляції співпадає, як співпадають кількість зірок та орбіт. Таке співпадання однозначно визначає повну систему рівнянь

$$M_i(n, n\Delta n) = \sum_{j=1}^8 \rho_j(q_j, b_j^*) e^{i(q_j n - b_j^* n \Delta a)} \quad (4)$$

або з урахуванням розбиття по зірках та їх орбітах у вигляді:

$$M_p(n, n\Delta n) = \sum_{l=1}^4 \rho_l(q_l, b_l^*) \sum_{m=1}^{n\text{зірки}} e^{i(q_l m n - b_l^* m n \Delta a)}$$

Система (4) не пов'язана з сингонією реального кристалла. Явний вигляд системи рівнянь для кристалів з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надґраткою:

$$(0, 0, 0): M_1 = \rho_1 + 3\rho_2 + \rho_3 + 3\rho_4;$$

$$(a, a, a): M_3 = \rho_1 - 3\rho_2 - \rho_3 + 3\rho_4;$$

$$(a, 0, 0): M_2 = \rho_1 + \rho_2 - \rho_3 - \rho_4;$$

$$(a, a, 0): M_4 = \rho_1 - \rho_2 + \rho_3 - \rho_4. \quad (5)$$

Розв'язок системи (5) має вигляд:

$$\rho_1 = \frac{M_1 + 3M_2 + M_3 + 3M_4}{8},$$

$$\rho_2 = \frac{M_1 + M_2 - M_3 - M_4}{8},$$

$$\rho_3 = \frac{M_1 - 3M_2 - M_3 + 3M_4}{8},$$

$$\rho_4 = \frac{M_1 - M_2 + M_3 - M_4}{8}.$$

Система (5) та її розв'язки визначають значення амплітуд  $\rho_j(q_j, b_j^*)$ , що описують гіпотетичну структуру з узагальненою формулою  $M_1(M_2)_3 M_3(M_4)_3$ . Структура  $BaTiO_3$  є дефектною по відношенню до  $M_1(M_2)_3 M_3(M_4)_3$  з вакансіями  $M_2=0$  і визначається локалізацією атомів у позиціях  $M_1=M_{Ba}$ ,  $M_3=M_{Ti}$ ,  $M_4=M_O$ . Тоді розв'язок системи (5) набуває вигляду:

$$\rho_1 = \frac{M_{Ba} + M_{Ti} + 3M_O}{8},$$

$$\rho_2 = \frac{M_{Ba} - M_{Ti} - M_O}{8},$$

$$\rho_3 = \frac{M_{Ba} - M_{Ti} + 3M_O}{8},$$

$$\rho_4 = \frac{M_{Ba} + M_{Ti} - M_O}{8}.$$

Причому, у визначенні модуляційних доданків приймають участь всі чотири зірки.

Збільшення кількості вакансій у кристалах  $Cu_3Au$  пов'язане з  $M_3=0$ . При локалізації атомів у позиціях  $M_1=M_{Au}$ ,  $M_2=M_3=0$ ,  $M_4=M_{Cu}$  одержимо такі розв'язки:

$$\rho_1 = \rho_3 = \frac{M_{Au} + 3M_{Cu}}{8},$$

$$\rho_2 = \rho_4 = \frac{M_{Au} - M_{Cu}}{8}.$$

Як відомо [3], складні кристали кубічної сингонії в концепції надпросторової симетрії можна описати, виходячи із ПК-, ГЦК- або ОЦК-базисів протокристалів. Конкретно, кристал  $Cu_3Au$  розглядається як сукупність чотирьох простих ґраток, вставлених одна в одну.

Так, виходячи з ГЦК-базису протокристалів цей опис виглядає наступним чином:

$$\rho_i' = \rho_i (1 + e^{i(q_1 n - b_1^* \Delta b)})$$

і однозіркового модулюючого доданку:

$$\delta\rho = \frac{\rho_2'}{\rho_1} \rho' \sum_{m=1}^3 e^{i(q_3 m n - b_3^* m \Delta b)}.$$

Матриця  $F_{Cu_3Au}$  на ПК-базисі протокристалів має вигляд:

$$F_{Cu_3Au}(ПК) = A \otimes I(2),$$

де  $I(2) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$  - тотожно-динична матриця.

На ГЦК-базисі протокристалів  $F_{Cu_3Au}(ГЦК) = A$ .

Структура типу  $Cu$  (ГЦК-ґратка) є найбільш простою в  $(3+d)$ -вимірному описі. Атоми локалізовані у позиціях:  $M_1=M_{Cu}$ ,  $M_2=M_3=0$ ,  $M_4=M_{Cu}$ . Це свідчить про те, що ГЦК-ґратка реалізується через структуру протокристалів

$$\rho_1 = \frac{M_{Cu}}{8}$$

та модулюючий доданок

$$\delta\rho_4(n, n\Delta n) = \frac{M_{Cu}}{8} e^{i(q_1 n - b_1^* n \Delta a)}.$$

Як видно, в даному випадку маємо справу із одновекторним фізичним збуренням протокристалів.

Таким чином, структура  $Cu$  характеризується

$$F_{Cu}(ПК) = A_{Cu} \otimes E(4) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \otimes E(4).$$

Одноатомний ГЦК-базис нового протокристалів передбачає:

$$F_{Cu}(ГЦК) = I \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

У структурі типу  $CsCl$  атоми локалізовані у позиціях  $M_1=M_{Cs}$ ,  $M_2=M_4=0$ ,  $M_{Cl}$ . Розв'язок набуває вигляду:

$$\rho_1 = \rho_4 = \frac{M_{Cs} + M_{Cl}}{8}; \rho_2 = \rho_3 = \frac{M_{Cs} - M_{Cl}}{8}$$

і дозволяє розглядати дану структуру, виходячи із ОЦК-базису протокристалів. При цьому визначник максимально спрощується до вигляду:

$$F_{CsCl} = A_{CsCl} \otimes I(4),$$

$$\text{де } A_{CsCl} = \begin{pmatrix} \rho_1 & \rho_3 \\ \rho_3 & \rho_1 \end{pmatrix}.$$

Неважко бачити, що й тут є можливість переходу до нового базису протокристалів. Це ОЦК-базис, що задається

$$F_W = A_W \otimes I(4),$$

$$\text{де } A_W = \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 \\ 0 & \rho_1 \end{pmatrix}.$$

Виходячи із ОЦК-базису протокристалів, для структури  $CsCl$  можливе також однозіркове модуляційне збурення.

До одновекторних структур відноситься і структура  $NaCl$ , в якій атоми локалізовані у позиціях  $M_1=M_2=M_{Na}$  і  $M_3=M_4=M_{Cl}$ . Враховуючи дані масові співвідношення розв'язок системи (5) набуває вигляду:

$$\rho_1 = \frac{M_{Na} + M_{Cl}}{2}, \rho_2 = \rho_4 = 0, \rho_3 = \frac{M_{Na} - M_{Cl}}{2}.$$

Її можна представити наступним чином:

$$F_{NaCl} = \begin{pmatrix} \rho_1 & \rho_3 \\ \rho_3 & \rho_1 \end{pmatrix} \otimes E(4) = A_{NaCl} \otimes E(4).$$

Перехід від кристалів типу  $NaCl$  до структури з ГЦК-ґраткою характеризується умовою  $\rho_3 = 1$ .

Еквівалентність матриць  $A_{NaCl}$  на ПК-базисі протокристалів і  $A_{CsCl}$  на ОЦК-базисі протокристалів приводить до еквівалентності відповідних секулярних рівнянь. Якісна зміна числа власних значень при зміні компонент потенціалу дефекту мас зручна при узагальненому розгляді динаміки кристалів з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -

надграткою. Всі кристали, за винятком  $NaCl$ , є дефектними по відношенню до загальної структури  $M_1(M_2)_3M_3(M_4)_3$ .

З іншого боку, дуже цікавим є розклад узагальненої динамічної матриці в поліном. Вид останнього дає можливість проводити аналіз змін фононних спектрів при граничних переходах між різними кристалічними структурами, зокрема, у сімействі кубічних кристалів з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою і є перспективним для дослідження їх фононних спектрів.

Слід відмітити, що в групу симетрії всіх кристалів даного сімейства входить інверсія, а отже, маємо справу тільки з дійсними коефіцієнтами, а для кубічних кристалів з  $(4a \times 4a \times 4a)$ -надграткою, присутніми є як дійсні, так і уявні частини в коефіцієнтах розкладу в кристалах без центру інверсії.

Канонічний запис розкладу в загальному випадку можна записати у вигляді:

$$a_n \omega^{2n} + a_{n-1} \omega^{2n-2} + a_{n-2} \omega^{2n-4} + \dots + a_0 = 0,$$

де  $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$  - коефіцієнти розкладу.

Для сімейства кристалів кубічної сингонії з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою, у загальному випадку,  $n=24$ . У секулярному рівнянні (1), одержаному в рамках концепції надпросторової симетрії, кожний елемент є сумою двох доданків. Тоді його можна представити у вигляді суми двох визначників [3], а саме,  $|D|$  та  $|F|$ , які мають вигляд (2) і (3), відповідно. Якщо здійснити перехід до розгляду конкретного реального кристала, наприклад, кристала  $VaTiO_3$ , то в даному випадку, всі коефіцієнти поліноміального розкладу від  $a_{16}$  до  $a_{24}$  включно зануляються. Цьому сприяє врахування відповідних масових співвідношень, а також виконання умови  $1 + B - C - A = 0$ ,

де  $A, B, C$  - Фур'є-компоненти оператора дефекту мас. Іншими словами, завжди можна здійснити таку комбінацію рядків та стовпчиків, що коефіцієнти розкладу, які стоять при  $\omega^{48}$  до  $\omega^{32}$  включно, дорівнюють нулеві.

Квазидіагональний вид матриць дозволяє представити коефіцієнти розкладу в поліном у виді добутку відповідних степеней їх мінорів:

$$a = M_D^k M_F^{n-k},$$

де  $M_D^k, M_F^{n-k}$  - мінори матриць  $(D)$  і  $(F)$   $k$ -го  $(n-k)$ -го порядків, відповідно. Для прикладу запишемо декілька коефіцієнтів розкладу:

$$a_0 = \prod_{j=1}^8 |D_{\alpha\beta}^{(j)}|,$$

$$a_1 = \prod_{j=1}^7 |D_{\alpha\beta}^{(j)}| \left\{ \omega^2 \sum_{\alpha=1}^3 M_{D\alpha}^{(2)} \right\}$$

де  $M_{Dx}^{(2)} = [D_{yy} D_{zz} - D_{yz} D_{zy}]$  - мінор матриці  $(D)$  2-го порядку; мінори  $M_{Dy}^{(2)}, M_{Dz}^{(2)}$  одержуються аналогічно шляхом циклічної перестановки індексів  $(x, y, z)$ :

$$a_2 = \prod_{j=1}^7 |D_{\alpha\beta}^{(j)}| \left\{ \omega^4 (D_{xx} + D_{yy} + D_{zz}) \right\} + \prod_{j=1}^6 |D_{\alpha\beta}^{(j)}| \left\{ \omega^4 \prod_{i,k=1}^2 M_{Di}^{(2)} M_{Dk}^{(2)} \right\};$$

$$a_{15} = \sum_{i,j,k=1}^8 |D_{\alpha\beta}^{(i)}| |D_{\alpha\beta}^{(j)}| |D_{\alpha\beta}^{(k)}| (M_{F1}^{(5)})^3 + \sum_{i,j,k=1}^8 |D_{\alpha\beta}^{(i)}| |D_{\alpha\beta}^{(j)}| |D_{\alpha\beta}^{(k)}| (M_{F2}^{(5)})^3,$$

де  $M_{F1}^{(5)}, M_{F2}^{(5)}$  - мінори матриці  $(F)$  5-го порядку:

$$M_{F1}^{(5)} = \begin{vmatrix} 1 & B & B & B & A \\ B & 1 & C & C & C \\ B & C & 1 & C & C \\ B & C & C & 1 & C \\ A & C & C & C & 1 \end{vmatrix},$$

$$M_{F2}^{(5)} = \begin{vmatrix} 1 & C & B & A & B \\ C & 1 & B & B & A \\ B & B & 1 & C & C \\ A & B & C & 1 & C \\ B & A & C & C & 1 \end{vmatrix}.$$

Структура визначника (1) дозволяє здійснити перехід до опису структур типів  $Cu_3Au, CsCl, NaCl$ . Найбільш важливими при цьому є безпосередні перетворення  $a_{13} = \dots = a_{24}$  для  $Cu_3Au$  та  $a_7 = \dots = a_{24}$  для  $CsCl, NaCl$ . Врахування відповідних масових співвідношень дозволяє одержати визначники 12-го (для кристалів типу  $Cu_3Au$ ) та 6-го порядків (для типів  $CsCl, NaCl$ ), розмірність яких і визначає необхідну кількість власних значень для чотирьох- та двохатомних кристалів.

Для кристалів типу  $Cu_3Au$  справджується масове співвідношення:  $A=1, B=C$ .

Тоді визначник  $|F|$  дещо спрощується, а саме:

$$|F| = -\omega^2 \times E \begin{vmatrix} 1 & C & C & C & 1 & C & C & C \\ C & 1 & C & C & C & 1 & C & C \\ C & C & 1 & C & C & C & 1 & C \\ C & C & C & 1 & C & C & C & 1 \\ 1 & C & C & C & 1 & C & C & C \\ C & 1 & C & C & C & 1 & C & C \\ C & C & 1 & C & C & C & 1 & C \\ C & C & C & 1 & C & C & C & 1 \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow -\omega^2 \times E \begin{vmatrix} 1 & C & C & C \\ C & 1 & C & C \\ C & C & 1 & C \\ C & C & C & 1 \end{vmatrix}$$

Таким чином, для цих кристалів секулярне рівняння має розмірність 12.

Що відноситься до кристалів типу  $CsCl$ , то ситуація тут значно спрощується. В цьому випадку маємо відповідні масові співвідношення:

$$C=1, A=B.$$

При цьому визначник  $|F|$  набуває вигляду:

$$|F| = -\omega^2 \times E \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & A & A & A & A \\ 1 & 1 & 1 & 1 & A & A & A & A \\ 1 & 1 & 1 & 1 & A & A & A & A \\ 1 & 1 & 1 & 1 & A & A & A & A \\ A & A & A & A & 1 & 1 & 1 & 1 \\ A & A & A & A & 1 & 1 & 1 & 1 \\ A & A & A & A & 1 & 1 & 1 & 1 \\ A & A & A & A & 1 & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow -\omega^2 \times E \begin{vmatrix} 1 & A \\ A & 1 \end{vmatrix}$$

У кристалах типу  $NaCl$  масові співвідношення такі:

$$C=B=0.$$

При цьому визначник  $|F|$  набуває вигляду:

А це, в свою чергу, приводить до такого визначника  $|F|$ :

$$|F| = -\omega^2 \times E \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & A \\ A & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

В квазидіагональному вигляді останній переписується слідуочим чином:

$$|F| = -\omega^2 \times E \begin{vmatrix} 1 & A & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & A \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A & 1 \end{vmatrix}$$

Звідси видно, що для цих кристалів також одержується секулярне рівняння 6-го порядку.

Отже, із усього вищесказаного можна зробити такі висновки:

1. якісна зміна числа власних значень визначника (1) при зміні коефіцієнтів потенціалу дефекту мас зручна при узагальненому розгляді динаміки ґратки кристалів з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надґраткою;
2. математику розрахунку законів дисперсії фононів  $\omega^2(k)$  можна побудувати, використовуючи явні вирази параметрів динамічної матриці протокристалла, а також вимоги узагальненої симетрії;
3. поліноміальний вид дає можливість проводити аналіз змін фононних спектрів при граничних переходах між різними кристалічними структурами у даному сімействі і є перспективним для дослідження їх фононних спектрів.

#### ЛІТЕРАТУРА

1. И.И.Небола, А.Ф.Иваняс, В.Я.Киндрат, Физика твердого тела.Т.35,№5,1852 (1993).
2. Г.Джеффрис, Б.Свирле, Методы математической физики (Мир,Москва,1969).
3. Т.Г.Стрижак, Елементи лінійної алгебри та конструктивна теорія визначників (Київ,Либідь,1993).