ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, No 2 (1997) с. 151–155

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 2 (1997) p. 151–155

КОЛИВНІ СПЕКТРИ СТРУКТУРНИХ ЕЛЕМЕНТІВ АМОРФНОГО SiO_2

О. М. Попель, О. В. Кнігініцький
Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики
Україна, UA–290005, Львів, вул. Драгоманова, 12
(Отримано 18 грудня 1996)

Розглянуто динамічні властивості окремого елемента структури аморфного SiO_2 — тетраедричного кластера SiO_4. Методами теорії ґруп одержано власні значення і власні вектори динамічної матриці кластера. Одержано просту умову для визначення параметрів двочастинкового потенціялу взаємодії між атомами у випадку існування ізольованого тетраедра типу SiO_4.

Ключові слова: тетраедричний кластер, динамічна матриця, точкова ґрупа симетрії, власні значення, власні вектори.

PACS number(s): 05.20.-y, 03.30.+p

Дослідження фізичних властивостей топологічно невпорядкованих систем у зв'язку з відсутністю в них трансляційної інваріянтности потребує аналізу енергетичних спектрів, зокрема, коливних, адекватних фрагментів їхньої структури. У цьому випадку можна йти шляхом розрахунку коливних спектрів деякої певної послідовності фраґментів структури (кластерів), які містять зростаючу кількість атомів, до досягнення певної стабільної функції розподілу коливних станів. Водночас можна сподіватися, що певні частоти коливань будуть "стійкими" щодо до змін розмірів кластера, наприклад, у тому випадку, коли вони відповідають осциляціям довжин валентних зв'язків чи кутів між ними як невід'ємних складових частин кластера незалежно від кількості атомів у ньому.

Виконання такої програми можливе з використанням числових методів, для застосування яких необхідно мати інформацію про потенціяли парної взаємодії між атомами з числовими значеннями усіх параметрів, що є в них. З цією метою доцільно проаналізувати коливний спектр деякого базового кластера, для якого була б змога порівняти результати аналітичного і числового розрахунків. Відповідно, для порівняння результатів аналітичного розрахунку коливного спектра з експериментальними даними базовий кластер доцільно вибрати максимально симетричним, коли для ідентифікації коливних станів можна використи їх тип симетрії.

Ми для топологічно невпорядкованої системи типу аморфного кремнієвого скла як базовий вибрали кластер, що складається з п'яти атомів — молекулу SiO_4 тетраедричної структури з точковою ґрупою симетрії T_d. Рівняння руху для атома з номером k ($k = 1, 2, 3, 4$ для атомів кисню, $k = 5$ для атома кремнію) має вигляд

$$m_k U_\alpha(k) + \sum_{\beta k'} \Phi_{\alpha\beta}(kk') U_\beta(k') = 0, \tag{1}$$

де m_k — маса атома з номером k, вектор $\mathbf{U}(k)$ — відхилення атома від положення рівноваги, $\Phi_{\alpha\beta}(kk')$ — матриця других похідних від потенціяльної енергії. Для гармонічних коливань шукаємо розв'язки (1) у вигляді

$$\mathbf{U}(k) = \frac{1}{\sqrt{m_k}} \mathbf{e}(k) e^{-i\omega t}. \tag{2}$$

Тоді для векторів "поляризації" зміщень, які після нормування

$$\sum_{\alpha k} |e_\alpha(k)|^2 = 1$$

вказують напрями зміщень і їхні відносні величини, отримаємо (в "операторній" формі) рівняння

$$(\hat{D} - \omega \hat{1})\hat{e} = 0. \tag{3}$$

Тут $\hat{D}$ — матриця з елементами

$$D_{\alpha\beta}(kk') = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(kk'),$$

яку далі будемо називати динамічною; $\hat{e}$ — вектор–стовпець з елементами $e_\alpha(k)$; $\hat{1}$ — одинична матриця розмірності $3l \times 3l$, де l — кількість атомів у кластері, ω — частота коливань.

Застосування теоретико–ґрупових методів дає змогу задачу на обчислення власних значень і власних векторів порядку $3l$ звести до задач меншої розмірності окремо для кожного незвідного зображення ґрупи T_d, яке трапляється в так званому механічному зображені, що є звідним і реалізує зображення цієї ґрупи в просторі зміщень атомів $\mathbf{U}(k)$. У позначеннях Ковальова [1] точкову ґрупу T_d становлять 24 операції поворотів, дзеркальних поворотів і відбивань $h_1 - h_{12}$, $h_{37} - h_{48}$. Для побудови механічного зображення достатньо вивести "закон перетворення" атомів кластера під час операцій симетрії, тобто функцію $F_0(k, h_i) = K$, де K — номер атома, місце якого займає атом k під час операцій h_i. Якщо, наприклад, $h_5 \mathbf{R}^0(2) = \mathbf{R}^0(3)$, то $k = 2$, $K = 3$, і тоді $F_0(2, h_5) = 3$. Тут $\mathbf{R}^0(k)$ — вектори рівноважних положень атомів, які вибрані так

$$\mathbf{R}^0(1) = (\tau,\tau,\tau), \quad \mathbf{R}^0(2) = (-\tau,\tau,-\tau),$$
$$\mathbf{R}^0(3) = (\tau,-\tau,-\tau), \quad \mathbf{R}^0(4) = (-\tau,-\tau,\tau),$$
$$\mathbf{R}^0(5) = (0,0,0).$$

Тоді матриці $\hat{T}(h_i)$ механічного зображення T мають вигляд

$$T_{\alpha\beta}(kk'|h_i) = (h_i)_{\alpha\beta}\Delta(k, F_0(k',h_i)), \tag{4}$$

де $(h_i)_{\alpha\beta}$ — матриці векторного зображення ґрупи T_d, $\Delta(k,K) = \delta_{kK}$ — символ Кронекера. Представлення (4) розкладається на такі незвідні зображення ґрупи T_d:

$$T = A_1 + E + F_1 + 3F_2. \tag{5}$$

Вираз (5) дає класифікацію коливань по типах симетрії: A_1 — повносиметричне, E — двовимірне, F_1, F_2 — тривимірні незвідні зображення ґрупи T_d. Отже, секулярна проблема (3) 15-го порядку зведеться до трьох проблем: 1-го порядку для невиродженого коливання симетрії A_1, подвійно виродженого — симетрії E і потрійно виродженого — симетрії F_1, а також до проблеми третього порядку для потрійно вироджених коливань симетрії F_2.

Щоб отримати вказані вище секулярні проблеми явно, слід встановити симетрію динамічної матриці $\hat{D}$ і з допомогою проекційних операторів Вігнера з'ясувати вигляд симетричних векторів поляризації. З цією метою використаємо співвідношення, що виражають факт комутації матриці $\hat{D}$ з матрицями механічного зображення

$$\hat{D} = \hat{T}(h_i)\hat{D}\hat{T}^{+}(h_i), \quad i = 1,\ldots,12,37,\ldots,48, \tag{6}$$

бо матриці $\hat{T}(h_i)$ — унітарні. Рівняння (6) дають змогу виразити 225 елементів матриці $\hat{D}$ через такі дев'ять:

$$\begin{aligned} &D_{xx}(11) = A, \quad D_{xy}(11) = B, \quad D_{xx}(55) = C,\\ &D_{xx}(12) = D, \quad D_{yy}(12) = E, \quad D_{xy}(12) = F,\\ &D_{xz}(12) = H, \quad D_{xx}(15) = G, \quad D_{xy}(15) = \tilde{G}. \end{aligned} \tag{7}$$

Явний вигляд матриці $\hat{D}$ наведено в додатку.

До умов (6) треба додати ще ті, які визначають відсутність сил, що не діють на будь-який атом, коли кластер переміщується або обертається як єдине ціле, за умови, що атоми перебувають у положеннях рівноваги. Ці умови мають такий вигляд:

$$\sum_{k'} \sqrt{m_{k'}} D_{\alpha\beta}(kk') = 0 \tag{8}$$

— для трансляцій і

$$\sum_{k'} \sqrt{m_{k'}} D_{\alpha\beta}(kk') R^0_\gamma(k') = \sum_{k'} \sqrt{m_{k'}} D_{\alpha\gamma}(kk') R^0_\beta(k') \tag{9}$$

— для обертань. У випадку використання явного вигляду матриці $\hat{D}$ умови (8) і (9) дають

$$\begin{aligned} &A + 2D + E + \gamma G = 0,\\ &B + H + \gamma\tilde{G} = 0,\\ &\gamma C + 4G = 0,\\ &A - E = B - 2F - H, \end{aligned} \tag{10}$$

де $\gamma = \sqrt{m_5}/\sqrt{m_1}$. Подальше спрощення матриці $\hat{D}$ пов'язане з використанням парного потенціялу взаємодії між атомами. Тоді потенціяльна енергія ґратки:

$$\Phi = \frac{1}{2}{\sum_{k,k'}}' \phi_{kk'}\,; \tag{11}$$

де $\phi_{k,k'} = \phi_{k,k'}(|\mathbf{R}(k,k')|)$; $\mathbf{R}(k,k') = \mathbf{R}(k) - \mathbf{R}(k')$, $\mathbf{R}(k)$ — миттєві положення атомів. Розклад за зміщеннями $\mathbf{U}(k) = \mathbf{R}(k) - \mathbf{R}^o(k)$ дає такий вигляд матриці $\Phi_{\alpha\beta}(k,k')$:

$$\begin{aligned} &\Phi_{\alpha\beta}(kk') = f^{(1)}_{kk'} R^o_\alpha(k,k') R^0_\beta(k,k') - f^{(2)}_{kk'}\delta_{\alpha\beta},\\ &f^{(1)}_{kk'} = \frac{\phi'_{kk'}}{(R^o(k,k'))^3} - \frac{\phi''_{kk'}}{(R^o(k,k'))^2},\\ &f^{(2)}_{kk'} = \frac{\phi'_{kk'}}{R^o(k,k')}, \end{aligned} \tag{12}$$

де $\phi'_{kk'}$ і $\phi''_{kk'}$ — відповідно перша і друга похідні від $\phi_{kk'}(R^o(k,k'))$ за аргументом.

З виразів (12) легко знайти, що

$$\Phi_{\alpha\beta}(kk') = pR^o_\alpha(k,k')R^0_\beta(k,k') - q\delta_{\alpha\beta} \tag{13}$$

для $k \neq k'$ і $k,k' = 1,\ 2,\ 3,\ 4$ та

$$\Phi_{\alpha\beta}(k5) = p_0 R^o_\alpha(k) R^0_\beta(k) - q_0\delta_{\alpha\beta} \tag{14}$$

для $k = 1,\ 2,\ 3,\ 4$, причому діягональні за індексом k елементи матриці $\Phi_{\alpha\beta}(kk)$ визначаються з умови

$$\Phi_{\alpha\beta}(kk) = -{\sum_{k'}}' \Phi_{\alpha\beta}(kk'), \tag{15}$$

У виразах (13) і (14) $p = f^{(1)}_{kk'}$, $q = f^{(2)}_{kk'}$ для довільних $k \neq k'$ при $k, k' = 1,\ 2,\ 3,\ 4$, $p_0 = f^{(1)}_{k5}$, $q_0 = f^{(2)}_{k5}$ для $k = 1,\ 2,\ 3,\ 4$. Для матричних елементів матриці $\hat{D}$ умови (13) і (14) дають ще такі два співвідношення

$$F = 0, \quad E = D - H. \tag{16}$$

Якщо залишати остаточно матричні елементи $D = (4\tau^2 p - q)/m_1$, $H = 4\tau^2 p/m_1$, $G = (\tau^2 p_0 - q_0)\gamma/m_1$ і $\tilde{G} = p_0\tau^2\gamma/m_1$, то одна з умов (10), (16) буде невикористаною і приведе до умови на параметри $p,\ q,\ p_0,\ q_0$, а саме:

$$\gamma(\tilde{G} - G) = 4(D - H)$$

або

$$q_0 + 4q = 0 \tag{17}$$

— умова на перші похідні і на параметри парного потенціялу у випадку існування стійкого кластера — молекули SiO_4. При цьому

$$\begin{aligned} A &= -\gamma G - 3D + H, \\ B &= -\gamma\tilde{G} - H, \\ C &= -\frac{4}{\gamma}G. \end{aligned} \tag{18}$$

Зауважимо, що співвідношення (10) необхідні для вилучення нульових частот, які відповідають переміщенням і обертанням кластера як цілого. Зокрема, для зображення F_1 $\omega^2(F_1) = (4q + q_0)/m_1$, так що умова (17) визначає наявність трьох власних значень динамічної матриці, що дорівнюють нулю.

Далі використаємо проекційний оператор Вігнера [2]

$$\hat{P}^{(j)}_{\lambda,\lambda'} = \sum_i \tau^{*(j)}_{\lambda,\lambda'}(h_i)\hat{T}(h_i) \tag{19}$$

для відшукання симетричних векторів поляризації $\hat{e}^{(j)}$ (таких, що є базисними векторами для відповідних незвідних зображень ґрупи T_d). У формулі (19) $\tau^{(j)}_{\lambda,\lambda'}(h_i)$ — матриці j-го незвідного зображення, $\hat{T}(h_i)$ — матриці механічного зображення (4). Діючи операторами Вігнера на довільні зміщення атомів послідовно, отримаємо:

для зображення A_1

$$e^{(A_1)}_\alpha(k) = a(1,1,1|\ \bar{1},1,\bar{1}|\ 1,\bar{1},\bar{1}|\ \bar{1},\bar{1},1|\ 0,0,0),$$

де риска зверху означає знак "-",

для зображення E

$$e^{(E,1)}_\alpha(k) = b(1,\varepsilon,\varepsilon^*|\ \bar{1},\varepsilon,\bar{\varepsilon}^*|\ 1,\bar{\varepsilon},\bar{\varepsilon}^*|\ \bar{1},\bar{\varepsilon},\varepsilon^*|\ 0,0,0)$$

і

$$e^{(E,2)}_\alpha(k) = b(\varepsilon,1,\varepsilon^*|\ \bar{\varepsilon},1,\bar{\varepsilon}^*|\ \varepsilon,\bar{1},\bar{\varepsilon}^*|\ \bar{\varepsilon},\bar{1},\varepsilon^*|\ 0,0,0),$$

де $\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{3}}$,

для зображення F_1

$$e^{(F_1,1)}_\alpha(k) = h(0,1,\bar{1}|\ 0,\bar{1},\bar{1}|\ 0,\bar{1},1|\ 0,1,1|\ 0,0,0),$$

$$e^{(F_1,2)}_\alpha(k) = h(\bar{1},0,1|\ 1,0,\bar{1}|\ 1,0,1|\ \bar{1},0,\bar{1}|\ 0,0,0),$$

$$e^{(F_1,3)}_\alpha(k) = h(1,\bar{1},0|\ 1,1,0|\ \bar{1},\bar{1},0|\ \bar{1},1,0|\ 0,0,0),$$

і для зображення F_2

$$e^{(F_2,1)}_\alpha(k) = (e,f,f|\ e,\bar{f},f|\ e,\bar{f},\bar{f}|\ e,f,\bar{f}|\ g,0,0),$$

$$e^{(F_2,2)}_\alpha(k) = (f,e,f|\ \bar{f},e,\bar{f}|\ \bar{f},e,f|\ f,e,\bar{f}|\ 0,g,0),$$

$$e^{(F_2,3)}_\alpha(k) = (f,f,e|\ f,\bar{f},e|\ \bar{f},f,e|\ \bar{f},\bar{f},e|\ 0,0,g),$$

де a, b, h, e, f, g — величини, які визначаються з таких рівнянь і умов нормування:

$$\begin{aligned} &\left[\frac{-\tau^2(32p + 3p_0)}{m_1} - \omega^2\right] a = 0, \\ &\left(\frac{-8\tau^2 p}{m_1} - \omega^2\right) b = 0, \\ &(0 - \omega^2)h = 0, \end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{cases} (\gamma G + \omega^2)e + 2\gamma\tilde{G}f - Gg = 0, \\ -\gamma\tilde{G}e + (\tilde{A} - \omega^2)f + \tilde{G}q = 0, \\ -4Ge - 8\tilde{G}f + \left(\dfrac{4}{\gamma}G + \omega^2\right) g = 0, \end{cases}$$

де

$$\tilde{A} = \frac{-2\tau^2(8p + p_0)}{m_1}.$$

Умови існування ненульових розв'язків визначають частоти коливань:
для симетрії A_1

$$\omega^2(A_1) = \frac{-\tau^2(32p + 3p_0)}{m_1},$$

для симетрії E

$$\omega^2(E) = \frac{-8\tau^2 p}{m_1},$$

для симетрії F_1

$$\omega^2(F_1) = 0, \tag{21}$$

для симетрії F_2

$$\omega_1^2(F_2) = 0,$$

$$\omega_2^2(F_2) = \frac{\tilde{A} - \tilde{\gamma}G}{2} + \sqrt{\frac{(\tilde{A} + \tilde{\gamma}G)^2}{4} + 2\gamma\tilde{\gamma}\tilde{G}^2},$$

$$\omega_3^2(F_2) = \frac{\tilde{A} - \tilde{\gamma}G}{2} - \sqrt{\frac{(\tilde{A} + \tilde{\gamma}G)^2}{4} + 2\gamma\tilde{\gamma}\tilde{G}^2},$$

де $\tilde{\gamma} = \frac{M}{\sqrt{m_1 m_5}}$, $M = 4m_1 + m_5$ — маса кластера.

Для обчислення значень частоти взято потенціял двочастинкової взаємодії між атомами у такому вигляді [3]:

$$\phi_{kk'}(R(k,k')) = \frac{H_{kk'}}{R(k,k')^{\eta_{kk'}}} + \frac{Z_k Z_{k'}}{R(k,k')} - \frac{\alpha_k Z_{k'}^2 + \alpha_{k'} Z_k^2}{2R(k,k')} e^{-\frac{R(k,k')}{R'}}$$

Цей потенціял досить точно описує ближній і проміжний порядки розташування атомів у аморфному SiO_2 у випадку моделювання методами молекулярної динаміки. Отримані в праці [2] на підставі даного потенціялу значення довжин зв'язків, функцій розподілу кутів між зв'язками добре узгоджуються з експериментальними даними [4, 5]. Значення констант у потенціялі наведено у таблиці, умова (17) для цього потенціялу задовольняється при $R' = 5.842$Å.

	Z_k	α_k
Si	1.6	0.0
O	-0.8	2.4
	$\eta_{kk'}$	$H_{kk'}$
Si-O	9	11.387
O-O	7	51.692

Таблиця. Значення констант у потенціялі взаємодії для кластера SiO_4. $H_{kk'}$ наведено в одиницях $e^2/$Å.

Використання цього потенціялу дає такі значення частот (в рад/с, у квадратних дужках наведені відповідні значення хвильових чисел в см$^{-1}$):

$$\omega(A) = 1.831 \cdot 10^{14} \quad [\ 972.1\ ]$$

$$\omega(E) = 7.048 \cdot 10^{13} \quad [\ 374.1\ ]$$

$$\omega_2(F_2) = 1.836 \cdot 10^{14} \quad [\ 974.4\ ]$$

$$\omega_3(F_2) = 9.879 \cdot 10^{13} \quad [\ 524.5\ ]$$

Для кожної з названих частот остаточний вигляд векторів "поляризації" коливань визначається з використанням умови нормування. Коливання симетрії F_1 з $\omega^2(F_1) = 0$ відповідає обертанню кластера як цілого, а коливання симетрії F_2 з $\omega_1^2(F_2) = 0$ — переміщенню його як цілого.

Для решти коливань маємо такі вектори "поляризації":

для коливання симетрії A_1

$$\hat{e}^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(1,1,1|\ \bar{1},1,\bar{1}|\ 1,\bar{1},\bar{1}|\ \bar{1},\bar{1},1|\ 0,0,0),$$

для коливань симетрії E

$$\hat{e}^{(E,1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(1,\varepsilon,\varepsilon^*|\ \bar{1},\varepsilon,\bar{\varepsilon}^*|\ 1,\bar{\varepsilon},\bar{\varepsilon}^*|\ \bar{1},\bar{\varepsilon},\varepsilon^*|\ 0,0,0),$$

$$\hat{e}^{(E,2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\varepsilon,1,\varepsilon^*|\ \bar{\varepsilon},1,\bar{\varepsilon}^*|\ \varepsilon,\bar{1},\bar{\varepsilon}^*|\ \bar{\varepsilon},\bar{1},\varepsilon^*|\ 0,0,0),$$

для коливань симетрії F_2

$$\hat{e}_i^{(F_2,1)} = c_i\left(\frac{\bar{\gamma}}{4},\alpha_i,\alpha_i|\ \frac{\bar{\gamma}}{4},\bar{\alpha}_i,\alpha_i|\ \frac{\bar{\gamma}}{4},\bar{\alpha}_i,\bar{\alpha}_i|\ \frac{\bar{\gamma}}{4},\alpha_i,\bar{\alpha}_i|\ 1,0,0\right),$$

$$\hat{e}_i^{(F_2,2)} = c_i \left(\alpha_i, \frac{\bar{\gamma}}{4}, \alpha_i |\ \bar{\alpha}_i, \frac{\bar{\gamma}}{4}, \bar{\alpha}_i |\ \bar{\alpha}_i, \frac{\bar{\gamma}}{4}, \alpha_i |\ \alpha_i, \frac{\bar{\gamma}}{4}, \bar{\alpha}_i |\ 0, 1, 0 \right),$$

$$\hat{e}_i^{(F_2,3)} = c_i \left(\alpha_i, \alpha_i, \frac{\bar{\gamma}}{4} |\ \alpha_i, \bar{\alpha}_i, \frac{\bar{\gamma}}{4} |\ \bar{\alpha}_i, \alpha_i, \frac{\bar{\gamma}}{4} |\ \bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_i, \frac{\bar{\gamma}}{4} |\ 0, 0, 1 \right),$$

де

$$c_i = \frac{2}{\sqrt{\gamma^2 + 32\alpha_i^2}}, \quad \alpha_i = \frac{\omega_i^2(F_2) + \tilde{\gamma} G}{8\tilde{G}}, \quad i = 2, 3.$$

Нормальні координати $\hat{Q}_i^{(j,\lambda)}$, що перетворюються за j-м незвідним зображенням і відповідають коливанню з частотою $\omega_i^2(j)$, можна легко отримати за співвідношенням

$$\hat{Q}_i^{(j,\lambda)} = \sum_{\alpha k} e_{i\alpha}^{*(j,\lambda)}(k) U_\alpha(k).$$

ДОДАТОК. ДИНАМІЧНА МАТРИЦЯ КЛАСТЕРА SIO_4.

$\begin{matrix} A & B & B \\ B & A & B \\ B & B & A \end{matrix}$	$\begin{matrix} D & F & H \\ -F & E & -F \\ H & F & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} E & -F & -F \\ F & D & H \\ F & H & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} D & H & F \\ H & D & F \\ -F & -F & E \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & \tilde{G} & \tilde{G} \\ \tilde{G} & G & \tilde{G} \\ \tilde{G} & \tilde{G} & G \end{matrix}$
$\begin{matrix} D & -F & H \\ F & E & F \\ H & -F & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} A & -B & B \\ -B & A & -B \\ B & -B & A \end{matrix}$	$\begin{matrix} D & -H & F \\ -H & D & -F \\ -F & F & E \end{matrix}$	$\begin{matrix} E & F & -F \\ -F & D & -H \\ F & -H & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & -\tilde{G} & \tilde{G} \\ -\tilde{G} & G & -\tilde{G} \\ \tilde{G} & -\tilde{G} & G \end{matrix}$
$\begin{matrix} E & F & F \\ -F & D & H \\ -F & H & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} D & -H & -F \\ -H & D & F \\ F & -F & E \end{matrix}$	$\begin{matrix} A & -B & -B \\ -B & A & B \\ -B & B & A \end{matrix}$	$\begin{matrix} D & -F & -H \\ F & E & -F \\ -H & F & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & -\tilde{G} & -\tilde{G} \\ -\tilde{G} & G & \tilde{G} \\ -\tilde{G} & \tilde{G} & G \end{matrix}$
$\begin{matrix} D & H & -F \\ H & D & -F \\ F & F & E \end{matrix}$	$\begin{matrix} E & -F & F \\ F & D & -H \\ -F & -H & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} D & F & -H \\ -F & E & F \\ -H & -F & D \end{matrix}$	$\begin{matrix} A & B & -B \\ B & A & -B \\ -B & -B & A \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & \tilde{G} & -\tilde{G} \\ \tilde{G} & G & -\tilde{G} \\ -\tilde{G} & -\tilde{G} & G \end{matrix}$
$\begin{matrix} G & \tilde{G} & \tilde{G} \\ \tilde{G} & G & \tilde{G} \\ \tilde{G} & \tilde{G} & G \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & -\tilde{G} & \tilde{G} \\ -\tilde{G} & G & -\tilde{G} \\ \tilde{G} & -\tilde{G} & G \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & -\tilde{G} & -\tilde{G} \\ -\tilde{G} & G & \tilde{G} \\ -\tilde{G} & \tilde{G} & G \end{matrix}$	$\begin{matrix} G & \tilde{G} & -\tilde{G} \\ \tilde{G} & G & -\tilde{G} \\ -\tilde{G} & -\tilde{G} & G \end{matrix}$	$\begin{matrix} C & 0 & 0 \\ 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & C \end{matrix}$

[1] О. В. Ковалев, *Неприводимые представления пространственных групп* (Изд-во АН УССР, Киев, 1961).

[2] Е. Вигнер, *Теория групп и ее применения к квантовомеханической теории атомных спектров* (ИЛ, Москва, 1961).

[3] P. Vanishta, R. K. Kalia, J. P. Rino, I. Ebbsjö, Phys. Rev. B **41**, 12997(1990).

[4] P. A. V. Johnnson, A. C. Wright, R. N. Sinclair, J. Non-Cryst. Sol. **58**, 109(1983).

[5] R. F. Pettifer, R. Dupree, I. Farnan, U. Sternberg, J. Non-Cryst. Sol. **106**, 408(1988).

THE VIBRATIONAL SPECTRA OF UNITS OF AMORPHOUS SiO_2

O. M. Popel, O. V. Knihinitskyi

Ivan Franko Lviv State University, Chair of Theoretical Physics

12 Drahomanov Str., UA–290005, Lviv, Ukraine

The dynamic properties of an isolated structure element of SiO_2 in the form of tetrahedra SiO_4 cluster are considered. Using the groups theory method the eigenvalues and eigenvectors of the dynamical matrix are calculated. The simple condition for the obtaining of the two-body interatomic potential parameters in the case or tetrahedral symmetry cluster is derived.