

На правах рукописи

Горбенко Евгений Евгеньевич

**ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕШЕТОК
СЖАТЫХ КРИСТАЛЛОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ
В МОДЕЛИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ АТОМОВ**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

*Автореферат диссертации
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук*

Луганск
2023

Работа выполнена на кафедре физики и методики преподавания физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Луганский государственный педагогический университет».

**Официальные
оппоненты:**

доктор физико-математических наук, доцент

Арефьева Людмила Павловна

(Донской государственный технический университет, факультет «Технология машиностроения», кафедра «Материаловедение и технологии металлов», доцент)

доктор физико-математических наук, профессор

Нефедев Константин Валентинович

(Дальневосточный федеральный университет, Институт наукоемких технологий и передовых материалов, департамент теоретической физики и интеллектуальных технологий, директор)

доктор физико-математических наук, профессор

Москвин Александр Сергеевич

(Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, кафедра теоретической и математической физики, профессор)

Защита диссертации состоится **20 сентября 2023** года в **15.00** часов на заседании диссертационного совета **ЮФУ801.01.06** по физико-математическим наукам (специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния и 1.3.20. Кристаллография, физика кристаллов**) на базе НИИ физики ЮФУ в здании НИИ физики по адресу: Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194, ауд. 411.

С диссертацией можно ознакомиться в Зональной научной библиотеке имени Ю. А. Жданова по адресу: г. Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 21 Ж и на сайте ЮФУ по ссылке: <https://hub.sfedu.ru/diss/show/1311822/>.

Автореферат разослан

___ июля 2023 года

Отзывы на автореферат диссертации (в нем должны быть указаны дата, полностью фамилия имя, отчество, ученая степень со специальностью, звание, организация, её подразделение, должность рецензента, адрес, телефон, e-mail и согласие рецензента на обработку своих персональных данных) с заверенной подписью рецензента и печатью организации просим направлять в 2-х экз. по почте на адрес: Гегузиной Г. А., ученому секретарю диссертационного совета ЮФУ801.01.06 в НИИ физики ЮФУ: 344090 Ростов-на-Дону, просп. Стачки, 194. НИИ физики ЮФУ, а также в формате .pdf – на e-mail адрес: geguzina@sfedu.ru.

Ученый секретарь диссертационного совета ЮФУ801.01.06

при НИИ физики ЮФУ

Гегузина Галина Александровна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Всестороннее исследование свойств кристаллов под высоким давлением представляет большой интерес с конца прошлого века, наряду с расширением возможностей экспериментальной техники: в 1992 году впервые были получены статические давления свыше 5 Мбар, намного превышающие давление в центре Земли (3,5 Мбар). Знакомство со структурными и упругими свойствами конденсированных веществ в недрах Земли потребуется для решения принципиальных задач в геофизике. В особенности принципиальным считается отношение скорости сейсмической волны к скорости упругой волны, рассчитанной для обычных пород. Это отношение является простым и самым прямым методом получения сведений о строении той части Земли, которая недостижима для непосредственного наблюдения.

Область мегабарных давлений увлекательна тем, что изменение энергии кристалла при сжатии сопоставимо с его энергией связи. При повышении давления, которое действует на твердое тело, усиливаются межатомные взаимодействия, и во многих случаях физические и химические свойства материала значительно изменяются. Важность первопринципного теоретического описания состояния вещества при сверхвысоком давлении не вызывает сомнений. Это связано с тем, что только объединив экспериментальные и теоретические результаты, мы можем понять как структуру вещества, так и ход процессов, происходящих в нем.

Среди огромного количества твердых тел особое внимание привлекают кристаллы инертных газов (КИГ), позволяющие изучать принципиальные особенности кристаллического состояния, проявляющиеся в этой группе кристаллов в наиболее рафинированном виде. Кристаллы инертных газов (атомарные криокристаллы – Ne, Ar, Kr и Xe), благодаря своей простой структуре, являются подходящими объектами для изучения многих фундаментальных проблем физики конденсированных сред, связанных с динамикой кристаллических решеток, а также для разработки и тонкой настройки новых вычислительных методов.

Поскольку сжатые КИГ широко используются в экспериментальной технике в качестве сред, передающих давление, то большой интерес представляет изучение их термодинамических и упругих свойств. Экспериментальные исследования свойств материалов под очень высоким давлением ставят ряд проблем, которые требуют теорий, разработанных специально для этих условий. Эти проблемы включают учет

многочастичного взаимодействия в динамике решетки и деформацию электронных оболочек атомов.

Представленное диссертационное исследование решает некоторые важные аспекты этих проблем. На основе неэмпирической версии динамической теории кристаллических решеток с деформируемыми атомами в дипольном и квадрупольном приближениях исследуются многочастичные взаимодействия и деформация электронных оболочек вследствие смещения ядер. Это позволяет разобраться в природе и соотношении тех сил, которые формируют упругие и термодинамические свойства КИГ при больших давлениях.

Всё вышеперечисленное говорит об **актуальности** построения из первых принципов такой теории, которая позволяет последовательно в рамках единого подхода количественно и в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными описывать свойства кристаллических тел в большом диапазоне давлений.

Цель работы: создание методов теоретического описания основного состояния, энергетических спектров фононов, термодинамических величин и упругих свойств сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов.

Для достижения цели необходимо решить следующие **основные задачи:**

1. Получить пригодную для количественного описания форму адиабатического потенциала кристаллов инертных газов с учетом деформации электронных оболочек атомов квадрупольного типа, параметры которого выражаются через матричные элементы гамильтониана электронной подсистемы на волновых функциях кристалла в основном и возбужденном состояниях.

2. Определить отдельные слагаемые в выражении адиабатического потенциала для разработки практически применимой модели межатомного потенциала отталкивания с учетом многочастичного взаимодействия.

3. Выявить влияние трехчастичного взаимодействия в короткодействующем потенциале отталкивания и деформации электронных оболочек дипольного и квадрупольного типа на фононы, динамические и термодинамические свойства кристаллов инертных газов в экстремальных условиях.

4. Рассчитать и провести сравнение с экспериментом большой совокупности термодинамических и упругих свойств кристаллических неона, аргона, криптона и ксенона в широком интервале давления.

Предметом исследования является построение неэмпирической версии квантово-механической модели деформируемых и поляризуемых атомов, пригодной для описания динамических и термодинамических свойств кристаллов. В качестве **объекта** такой теории выбраны кристаллы инертных газов.

Научная новизна заключается в том, что впервые в широкой области давления построена динамическая теория кристаллических решеток инертных газов, основанная на *ab initio* потенциале отталкивания с учетом многочастичных взаимодействий и деформации электронных оболочек в дипольном и квадрупольном приближениях.

- Предложен уникальный метод выражения короткодействующего потенциала отталкивания в виде степенного разложения малых параметров – интеграла перекрытия электронных волновых функций соседних атомов.

- На основе *ab initio* расчетов короткодействующего отталкивания на базе метода Хартри – Фока предлагается простая форма трехчастичного взаимодействия без вариационных и подгоночных параметров.

- Изучено влияние трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек на фононы и динамическую неустойчивость КИГ при высоком давлении.

- На основе динамической матрицы с учетом деформации электронных оболочек дипольного типа в парном приближении рассчитаны термодинамические величины КИГ в широком интервале давления и температуры.

- Доказано, что трехчастичные и квадрупольные параметры деформации электронных оболочек атомов одного порядка, что говорит о необходимости совместного учета многочастичного и квадрупольного взаимодействий.

- В рамках развитой теории с учетом многочастичных сил и деформации электронных оболочек квадрупольного типа (квадрупольное взаимодействие) рассчитаны упругие модули всего ряда сжатых КИГ, которые находятся в хорошем согласии с экспериментом.

- Показано, что для каждого объекта исследования зависимость отклонения от соотношения Коши является результатом двух конкурирующих взаимодействий – многочастичного и квадрупольного.

– Доказана важность учета деформации электронных оболочек при расчете атомных свойств кристаллов инертных газов под давлением.

Практическая и теоретическая значимость работы. Практическое применение КИГ связано с возможностью использования их в качестве хладагентов, рабочей среды для передачи большого гидростатического давления при низких температурах, ядерного горючего для лазерного или электронно-лучевого метода запуска термоядерной реакции, гранулированного твердого топлива для тепловых двигателей. В диссертации дано теоретическое обоснование возможности получения новых материалов с новыми физическими и химическими свойствами с помощью высокого давления. Результаты, полученные в диссертационном исследовании, могут быть применены для кристаллов, находящихся в напряженном состоянии, с различным типом химической связи, так как остовы тех элементов, которые их образуют, имеют электронную оболочку инертных газов.

Основные научные положения, выносимые на защиту:

1. Учет эффектов деформации электронных оболочек атомов дипольного типа, в парном и трехчастичном приближениях, приводит (описывает) к размягчению «критических» колебаний и динамической неустойчивости ГЦК-кристаллов инертных газов в условиях высокого давления при расчете фононных частот.

2. Вклад деформации электронных оболочек дипольного типа в теплоемкость сжатых кристаллов инертных газов растёт с увеличением внешнего давления для Ne, Kr и Xe, и наиболее значителен в Ar.

3. Учет трехчастичного и квадрупольного взаимодействий практически не изменяет объемный модуль B_{11} , но дает основную поправку в сдвиговый модуль B_{12} , в то время как в модуль B_{44} основной вклад дает квадрупольное взаимодействие.

4. С учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий в расчетах на основе парного потенциала в режиме высокого давления линейная зависимость модулей упругости от давления нарушается, что приводит к наблюдаемому экспериментально превращению в нуль упругого модуля B_{44} для ксенона при 75 ГПа, обеспечивая ГЦК-ГПУ переход.

5. Зависимость отклонения от соотношения Коши индивидуальна для каждого из КИГ: для неона, криптона и ксенона вклады двух конкурирующих взаимодействий – квадрупольного и многочастичного – с неплохой точностью компенсируют друг друга, а в упругих свойствах кристаллического аргона преобладает многочастичное взаимодействие.

Компенсация взаимодействий в случае Ne, Kr и Xe дает незначительную барическую зависимость $\delta(p)$ в абсолютном согласии с экспериментом.

6. Построенная модель динамики решетки сжатых кристаллов инертных газов, включающая параметры трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек, адекватно описывает поведение кристаллов инертных газов под давлением в хорошем согласии с экспериментом.

Личный вклад автора заключается в его участии на всех стадиях исследования: определение цели и задач исследования, а также способов их решения; проведение численных расчетов; анализ полученных результатов; сбор и обобщение в виде аналитического обзора результатов теоретических и экспериментальных исследований по теме диссертационной работы; формулирование научных положений, выносимых на защиту, новизны, практической значимости и выводов по работе, подготовка публикаций. Автором на основе аналитических выражений создан комплекс программ для ПЭВМ и проведены исследовательские расчеты.

Совместно с д.ф.-м.н., ст.н.с. Троицкой Е.П., которая длительное время являлась научным консультантом работы, а также к.ф.-м.н. Пилипенко Е.А. формулировались задачи работы, определялись способы их решения и обсуждались результаты диссертационного исследования. Обсуждение многих вопросов, затронутых в работе, на разных этапах её выполнения, проводились с д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. Варюхиным В.Н., д.ф.-м.н., проф. Тарасенко С.В., д.ф.-м.н., проф. Юрченко В.М., д.ф.-м.н., проф. Резниченко Л.А., д.ф.-м.н. Вербенко И.А., к.ф.-м.н. Драгуновым И.Е., к.ф.-м.н., доц. Сильчевой А.Г., к.ф.-м.н., доц. Кара-Мурза С.В., вед. инженером Чабаненко В.В.

Глубокую благодарность адресую всем вышеперечисленным ученым, долготейшее плодотворное сотрудничество с которыми, во многом, определило научное мировоззрение автора и без творческого общения с которыми не состоялась бы данная научная работа.

Апробация результатов. Результаты представленной диссертации прошли апробацию на следующих различного уровня конференциях и симпозиумах:

Международная конференция «Высокие давления. Фундаментальные и прикладные аспекты» («НР–2004, 2006, 2008, 2010, 2012») (2004, 2006, 2008, 2010, 2012 г.г., Судак, Крым, Украина); Міжнародна конференція студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики («Еврика–

2005, 2006, 2007, 2008, 2009, 2010, 2011, 2013») (2005, 2006, 2007, 2008, 2009, 2010, 2011, 2013 р.р., Львів, Україна); Fifth International Young Scientists' Conference on Applied Physics (2005, Kyiv, Ukraine); Annual Conference in Ukraine "Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications" (2005, Lviv, Ukraine); Третя Всеукраїнська конференція молодих вчених та спеціалістів «Надтверді, композиційні матеріали та покриття: отримання, властивості, застосування» (2006, Київ, Україна); International Conference on Cryocrystals and Quantum Crystals ("CC-2006") (2006, Kharkov, Ukraine), ("CC-2010") (2010, Chernogolovka, Russia), ("CC-2012") (2012, Odessa, Ukraine); International Conference in Ukraine on Statistical Physics 2006 "Condensed Matter: Theory & Applications" (2006, Kharkiv, Ukraine); International Conference "Functional Materials" ICFM-2007 (2007, Partenit, Crimea, Ukraine); Всеукраїнська наукова конференція молодих вчених „Фізика низьких температур» («КМВ-ФНТ-2008, 2009) (2008, 2009 р.р., Харків, Україна); Міжнародна науково-практична конференція «Структурна релаксація у твердих тілах» (2009, Вінниця, Україна); International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics" ("Low Temperature Physics"—2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015) (2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015 г.г., Kharkiv, Ukraine); Международная научно-практическая конференция «Актуальные проблемы и достижения в естественных и математических науках» (2015, Самара, Российская Федерация); Международная научно-практическая конференция «Открытые физические чтения» («Открытые физические чтения»—2015, 2016) (2015, 2016 г.г., Луганск, Украина); Международный междисциплинарный молодежный симпозиум «Физика бесвинцовых пьезоактивных и родственных материалов (анализ современного состояния и перспективы развития)» (LFPM-2015, 2016, 2017, 2019, 2020) (2015, 2016, 2017, 2019, 2020 г.г., Ростов-на-Дону—Туапсе, Российская Федерация); International Conference on "Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications" (PHENMA-2016) (2016, Surabaya, Indonesia), (PHENMA-2017) (2017, Jabalpur, India), (PHENMA-2019) (2019, Hanoi, Vietnam); Международная научная конференция «Донецкие чтения 2019: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности» (2019 г., Донецк, Украина); Международная научно-практическая конференция «Современные методы исследования и диагностики поверхности» (2021, Грозный, Российская Федерация).

Публикации. По теме диссертации автором опубликованы 87 работ, в том числе: 20 статей в ведущих российских журналах, входящих в Перечень ВАК Минобрнауки РФ и зарубежных журналах, входящих в мировые БД

(WoS, Scopus), 21 статья, входящая в БД «РИНЦ», 2 главы в коллективных зарубежных монографиях из БД «Scopus» и 44 публикации автора представлены в сборниках материалов, трудах, тезисах конференций различного уровня и других изданиях. Список публикаций по теме диссертации, номера которых снабжены литерой “А”, приведен в конце автореферата.

Работа выполнялась в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ) «Экологически чистые материалы для инновационных multifunctional систем: от цифрового дизайна к производственным технологиям» 2020 – 2022 годы и проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ) «Мультикомпонентные интеллектуальные структуры: фазопереходные кроссинг-эффекты и стратегии ускоренного дизайна эко-систем для технологий цифрового проектирования устройств контроля параметров физических сред» 2023 – 2025 годы.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, девяти приложений, заключения, в котором представлены основные результаты и выводы работы, перечня цитируемых литературных источников и списка публикаций автора. Общий объем диссертации составляет 210 страниц машинописного текста, включая 28 рисунков и 19 таблиц, 128 источников отражены в списке цитируемой литературы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

Во **введении** обсуждается актуальность темы научных исследований, формулируются цель и задачи работы, приводятся предмет и объекты исследования, научная новизна, практическая и теоретическая ценность, представляются выносимые на защиту основные научные положения, личные вклады автора и его коллег, описываются апробация результатов работы, публикации и структура диссертации.

Первый раздел содержит краткий обзор модельных потенциалов и неэмпирических расчетов, использующихся для изучения свойств КИГ под давлением и без него. Адиабатический потенциал, который необходим для построения динамики решетки, может быть либо рассчитан из первых принципов, либо аппроксимирован известной функцией расстояния, то есть

использован метод межатомных модельных (эмпирических) потенциалов. Среди всех модельных потенциалов выделяются несколько преимущественных.

Самым популярным и простым является потенциал Леннард-Джонса с двумя подгоночными параметрами – это наименьшее число параметров, с помощью которых можно описать парное взаимодействие в КИГ [1]

$$\phi(r) = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Значения подгоночных параметров ϵ и σ могут быть определены из экспериментальных данных по изучению твёрдой фазы конкретного вещества.

В конце прошлого века наиболее точным из эмпирических парных потенциалов для КИГ был признан многопараметрический потенциал HFD (Hartree – Fock Dispersion) и его разновидности – потенциалы Азиза – Чена, Азиза – Сламана и др. [2, 3, 4]. В рамках различных моделей трехчастичного взаимодействия в кристаллах инертных газов удается довольно успешно описать ГЦК-ГПУ переход, уравнение состояния, фононную дисперсию и упругие свойства, включая отрицательное отклонение от соотношения Коши в КИГ в широкой области давления (см. [5, 6, 7, 8, 9] и ссылки там).

Далее рассмотрен альтернативный метод – метод неэмпирических расчетов свойств кристаллов на основе теории функционала плотности (density-functional theory – DFT). В первопринципных методах не используются подгоночные параметры и феноменологические модели, нужно знать только элементный состав и форму кристаллической решетки. Один из таких методов – метод расчета физических свойств кристалла по теории функционала плотности. Как известно, основной переменной DFT является электронная плотность $\rho(\mathbf{r})$, которая, согласно теореме Хоэнберга – Кона [10], полностью определяет все свойства электронной структуры

системы. Этот метод дает хорошие результаты в сложных системах (см., например, обзор [11] и ссылки там).

За последние 15-20 лет отдельно следует выделить *ab initio* расчеты различных свойств сжатых КИГ на основе теории функционала плотности [10] и приближения локальной плотности (local density approximation – LDA) для обменно-корреляционного потенциала [12]. Это работы по упругим свойствам, фазовым переходам, электронной структуре и колебательным свойствам КИГ под давлением [13, 14, 15, 16, 17]. Авторы работы [14] предполагают, что увеличение плотности заряда в результате сжатия приведет к улучшению приближения LDA, хотя известно, что приближение локальной плотности плохо описывает системы, связанные слабыми силами Ван-дер-Ваальса [18]. Как оказалось, упругие свойства в DFT [14] описываются не совсем точно, а именно теоретическая зависимость отклонения от соотношения Коши $\delta(p)$ не соответствует эксперименту в случае Ne, Kr и Xe [19].

Модельные потенциалы в теории «жестких» атомов могут феноменологически учитывать изменение электронных состояний, обусловленное образованием кристалла из изолированных атомов и смещениями ядер, за счет введения большого числа подгоночных параметров (например, оболочечная модель Дика и Оверхаузера [20]). Это изменение более естественно учитывать добавкой примеси возбужденных состояний к Ψ -функции основного состояния электронной подсистемы. Именно таким путем в пионерских работах К.Б. Толпыго [21, 22, 23] было реализовано адиабатическое приближение в щелочно-галогидных и гомеоплярных кристаллах. Впоследствии указанный метод был применен нами к атомарным кристаллам [24]. При рассмотрении деформируемых электронных оболочек ионов учитывается отклик электронной системы кристалла на колебания ядер. Первоначально рассматривалась только «дипольная» деформация атомов, когда изменение состояния каждого атома характеризовалось всего тремя параметрами – составляющими дипольного

момента его электронной оболочки $\mathbf{r}_s^l$. На этой основе изучались спектры многих кристаллов [25]. Для объяснения ряда особенностей фононного спектра у щелочно-галогидных кристаллов оказалось необходимым включить и квадрупольную деформацию атомов [26]. Такое рассмотрение было распространено на кристаллы инертных газов [27, 28]. Итак, для неметаллических кристаллов стал возможен единый подход, что позволило реализовать адиабатическое приближение Борна – Оппенгеймера, а также рассмотреть деформацию электронных оболочек атомов при ядерных колебаниях.

В результате для КИГ было получено выражение для потенциальной энергии решетки $U = \min \bar{H}$ с учетом деформации электронных оболочек атомов. В классической версии теории Толпыго для расчета свойств КИГ при нормальном давлении силовые параметры, представленные как первая и вторая производная от потенциала короткодействия, параметры деформации электронных оболочек, а также параметр Ван-дер-Ваальса находились из эксперимента в отсутствии давления.

При высоких давлениях короткодействующее отталкивание Борн – Майера (определяемое электронной структурой атомов кристалла) становится больше, чем сила притяжения (определяемая типом химических связей).

Во **втором** разделе строится *ab initio* теория многочастичного взаимодействия. Связанная с деформацией и перекрытием электронных оболочек атомов кристалла в дипольном приближении потенциальная энергия короткодействия записывается как

$$E_{sr} = \sum_{l'}^{n,n} U_{sr}(|\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{l'}|) = \sum_{l'} \langle 00 | \hat{H}_{sr}^{ll'} | 00 \rangle + \alpha(\beta^l)^2 + \sum_{\alpha\beta}^9 \beta_{44} (D_{\alpha\beta}^l)^2 - 2 \left(\sum_i \frac{1}{\Delta_i} \sum_{l'} \langle 00 | \hat{H}_{sr}^{ll'} | i0 \rangle \right)^2. \quad (2)$$

Сумма $\sum_{\alpha\beta}^9$ указывает на необходимость перебора всех девяти комбинаций индексов α, β (при этом из девяти компонентов $Q_{\alpha\beta}^l$ независимыми есть только пять); $\sum_{l'}^{n.n.}$ – суммирование по ближайшим соседям;

$$\mathbf{P}^l = \frac{1}{\alpha} \sum_i \sum_{l'}^{n.n.} \frac{\langle 0 | \mathbf{P}^l | i \rangle \langle i | \hat{H}_{sr}^{ll'} | 00 \rangle + c.c.}{E_i - E_0}, \quad D_{\alpha\beta}^l = \frac{1}{\beta_{44}} \sum_i \sum_{l'}^{n.n.} \frac{\langle 0 | \hat{Q}_{\alpha\beta}^l | i \rangle \langle i | \hat{H}_{sr}^{ll'} | 00 \rangle + c.c.}{E_i - E_0}. \quad (3)$$

Матричные элементы дипольных и квадрупольных моментов:

$$\langle 0 | \mathbf{P}^l | i \rangle = \int \psi_0^l \cdot \mathbf{P}^l \psi_i^l d\tau, \quad \langle 0 | \hat{Q}_{\alpha\beta}^l | i \rangle = \int \psi_0^l \cdot \hat{Q}_{\alpha\beta}^l \psi_i^l d\tau. \quad (4)$$

Для определения параметров короткодействия, рассмотрим первое слагаемое в (2) на основе метода Хартри – Фока в базисе атомных орбиталей, точно ортогонализованных на разных атомах кристалла [29].

В работе [A9] нами было показано, как выразить короткодействующий потенциал отталкивания E_{sr} через степенной ряд интеграла перекрытия волновых функций электронов соседних атомов S , который является малым параметром.

$$E_{sr} = E^{(0)}(S^2) + W_2(S^2) + W_3(S^3) + W_4(S^4) + W_5(S^5) + W_6(S^6), \quad (5)$$

$$E^{(0)} = \sum_l E_a^l + \sum_{l,m} ' \langle \mathbf{l}s | V_{en}^m + V_0^m + V_{ex}^m | \mathbf{l}s \rangle, \quad (6)$$

где $\varphi_s(\mathbf{r}-\mathbf{l}) = |\mathbf{l}s\rangle$ – атомная орбиталь, то есть волновая функция электрона в изолированном атоме, которая центрирована на узле l решетки в состоянии с номером s ($\mathbf{l}$ и $\mathbf{m}$ проходят через все N узлов). Штрих у знака суммы означает $\mathbf{m} \neq \mathbf{l}, \mathbf{l} \neq \mathbf{l}', \mathbf{m} \neq \mathbf{l} \neq \mathbf{l}'$.

Первый член в (6) является суммой энергий изолированных атомов, не зависящей от расстояния между атомами в кристалле. Второй член (6) представляет собой двухцентровые интегралы (матричные элементы от потенциала электрон-ионного взаимодействия V_{en}^m , потенциала нейтрального

изолированного атома V_0^m и потенциала обменного межатомного взаимодействия V_{ex}^m , которые построены на атомных орбиталях $|\mathbf{l}s\rangle$). W_2 в (5) содержит только двухцентровые интегралы и соответствует двухчастичным взаимодействиям в кристалле:

$$W_2 = -2 \sum_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \sum_{ss'} P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \langle \mathbf{l}'s' | V_0^{\mathbf{l}} + V_{ex}^{\mathbf{l}} | \mathbf{l}s \rangle - \sum_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \sum_{ss'tt'} P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} P_{tt'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} \langle \mathbf{l}s' \mathbf{m}t' | v_C | \mathbf{m}st \rangle, \quad (7)$$

где

$$\langle \mathbf{l}s' \mathbf{m}t' | v_C | \mathbf{m}st \rangle = \int \varphi_{s'}^*(\mathbf{r}-\mathbf{l}) \varphi_t^*(\mathbf{r}'-\mathbf{m}) v_C(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \varphi_s(\mathbf{r}-\mathbf{m}) \varphi_l(\mathbf{r}-\mathbf{l}) d\tau d\tau'; \quad v_C(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

W_3 в (5) представляет собой поправку 3-й степени по S , которая включает 3-центровые интегралы

$$W_3 = -2 \sum_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \sum_{ss'} P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} (I-S)_{s's}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \varepsilon_{\mathbf{l}s} - 2 \sum_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \sum_{ss'} P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \left\langle \mathbf{l}'s' \left| \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{l}, \mathbf{m} \neq \mathbf{l}'} (V_0^{\mathbf{m}} + V_{ex}^{\mathbf{m}}) \right| \mathbf{l}s \right\rangle - 2 \sum_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \sum_{ss'tt'} P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} P_{tt'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} \langle \mathbf{l}'s' \mathbf{m}t' | v_C | \mathbf{l}st \rangle. \quad (8)$$

Здесь $\varepsilon_{\mathbf{l}s}$ – энергия хартри-фоковской орбитали $\varphi_s(\mathbf{r}-\mathbf{l})$.

В выражениях (7) и (8) $P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$ – элементы ортогонализирующей матрицы $\mathbf{P} = \mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{S})^{-1}$ ($\mathbf{I}$ – единичная матрица). Элементы матрицы $\mathbf{S}$ равны интегралам перекрытия между двумя атомными орбиталями, центрированными на разных узлах $S_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} = \langle \mathbf{l}s | \mathbf{l}'s' \rangle = \int \varphi_s^* \varphi_{s'} d\tau$.

В пределе малых $S \ll 1$ $P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} = S_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} + O(S^2)$, $P_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} = -(S^2)_{ss'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} + O(S^3)$.

Поправка W_4 четвертой степени по S – смешанного типа. Она содержит одноцентровые, двухцентровые, трехцентровые и четырехцентровые интегралы. Поправка пятой степени $W_5(S^5)$ содержит только трехцентровые интегралы, а поправка шестой степени $W_6(S^6)$ только двухцентровые. Выражения $W_4(S^4) - W_6(S^6)$ приведены в нашей работе [A10].

Двухцентровые кулоновские интегралы были рассчитаны точно на основе таблиц [30]. Найденные при этом закономерности были использованы

для аппроксимации трех- и четырехцентровых интегралов произведениями соответствующих интегралов перекрытия.

Тогда для случая, когда атомы l, l', l'' образуют равносторонний треугольник и для $S \ll 1$ выражение W_3 (7) можно привести к виду

$$W_3 = - \sum_{ll'l''} \left(S(r^{ll''}) \right)^2 f(r_1), \quad f(r_1) = \frac{S(r_1)}{r_1}, \quad r_1 = \left| \mathbf{r}^{l'} - \frac{1}{2} \mathbf{r}^{ll''} \right|, \quad (9)$$

где $|\mathbf{r}^{ll''}| = r_0$, $S = S_{np_z np_z}^{ll''}$ – самый большой между внешними np -орбиталями интеграл перекрытия. W_3 зависит как от $r^{ll'}$ и $r^{ll''}$, так и от $(\mathbf{r}^{ll'} \cdot \mathbf{r}^{ll''})$ (чего не скажешь о парном потенциале $W_2(r^{ll'})$). Как показано в [A10, A15], наши короткодействующие потенциалы (двухчастичный $U_{sr}(S^2) = E^{(0)} + W_2$ и трехчастичный $U_{sr}(S^3) = E^{(0)} + W_2 + W_3$) хорошо согласуются с соответствующими лучшими эмпирическими потенциалами [7] в широкой области сжатия.

Определим тот вклад в уравнения движения для Фурье-компонент $\mathbf{p}(\mathbf{k}) = e\mathbf{u}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{P}(\mathbf{k})$, который вносит трехчастичное взаимодействие W_3 (см. [24]). Разложив (9) по смещениям $\mathbf{u}^l, \mathbf{u}^{l'}$ и $\mathbf{u}^{l''}$, и продифференцировав по $\mathbf{u}^l$, получим нецентральную силу, а также её Фурье-компоненту F_α подстановкой в полученное выражение $e\mathbf{u}^l = \mathbf{p}e^{i\mathbf{k}l}$. Просуммировав по l', l'' , получаем члены, которые по-разному зависят от волнового вектора $\mathbf{k}$. Некоторые из них имеют такую же зависимость от волнового вектора, как и в случае парного взаимодействия. По этой причине появляются некоторые добавки δH и δG к параметрам H и G . Если их переопределить таким образом, что $G \rightarrow G_0 + \delta G$ и $H \rightarrow H_0 + \delta H$, то они перестанут выражаться через первую и вторую производные от функции расстояния. δH и δG , являющиеся трехчастичными поправками и которые приводят к нецентральности парного взаимодействия, записываются следующим образом:

$$\delta H = -\frac{16a^3}{e^2} S(r_0) [2S_2(r_0) f(r_1) + 3S(r_0) f_2(r_1) - 2S_1(r_0) f_1(r_1)], \quad (10)$$

$$\delta G = -\frac{16a^3}{e^2} [2S(r_0)S_3(r_0) f(r_1) + S_1^2(r_0) f(r_1) + 4S(r_0)S_1(r_0) f_1(r_1) + 9S^2(r_0) f_3(r_1)]. \quad (11)$$

Здесь $r_0 = a\sqrt{2}$, $r_1 = a\sqrt{6}/2$. S_i , а также f_i выражаются как 1-я и 2-я производные от интеграла перекрытия $S(r^{II})$.

Помимо этого учет W_3 (9) приводит в уравнении движения для $p_x(\mathbf{k})$ к появлению нового слагаемого с новой зависимостью от $\mathbf{k}$.

$$F_x = \frac{e^2}{a^3} V_t p_x (1 - \cos k_1 \cos k_2), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \Omega^2 p_x = & hP_x \mu(\mathbf{k}) + g \left[P_x \cdot \nu_x(\mathbf{k}) + \sum_{\beta \neq x} P_\beta \cdot \tau_{x\beta}(\mathbf{k}) \right] + Hp_x \mu(\mathbf{k}) + G \left[p_x \nu_x(\mathbf{k}) + \sum_{\beta \neq x} p_\beta \tau_{x\beta}(\mathbf{k}) \right] + \\ & + V_t p_x (1 - \cos k_y \cos k_z) + B \sum_{\beta} p_\beta \chi_{x\beta}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\text{где } V_t = 64 \frac{a^3}{e^2} \left[S(r) \frac{a}{r} \frac{dS(r)}{dr} \right]_{r=a\sqrt{2}} \left[\frac{a}{R} \frac{df(R/2)}{dR} \right]_{R=a\sqrt{6}}. \quad (14)$$

Здесь мы вводим безразмерные частоты $\Omega = \omega \sqrt{ma^3/e^2}$ и функции безразмерного волнового вектора:

$$\begin{aligned} \mu(\mathbf{k}) = 3 - \sum_{\gamma < \beta} \cos k_\gamma \cdot \cos k_\beta; \quad \nu_x(\mathbf{k}) = 2 - \cos k_x \sum_{\beta \neq x} \cos k_\beta; \\ \tau_{x\beta}(\mathbf{k}) = \sin k_x \cdot \sin k_\beta. \end{aligned} \quad (15)$$

В результате суммирования по решетке довольно таки дальнотействующие силы Ван-дер-Ваальса приводят к функциям $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ [31]. Такие же по действию кулоновские силы в результате суммирования приводят к функциям $\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ [25]. Параметры $H = H_0 + \delta H, G = G_0 + \delta G$, H_0 и G_0 являются первой и второй производными парного короткодействующего потенциала отталкивания для равновесных расстояний первых соседей.

Влияние трехчастичного взаимодействия за счет перекрытия электронных оболочек атомов отражается при всех волновых векторах, в том числе и на наклон ветвей при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Кроме этого, рассмотрено трехчастичное взаимодействие, обусловленное взаимной деформацией электронных оболочек атомов (2 и 4 слагаемые в (2)) в дипольном приближении. Зависимость от координат атомов этих слагаемых определяется матричным элементом $\langle 00 | \hat{H}_{sr}^{III} | i0 \rangle$ и поэтому они связаны с деформацией электронных оболочек атомов. Как оказалось, эти трехчастичные силы не дают новой зависимости от $\mathbf{k}$, по сравнению с «парной» деформацией электронных оболочек в дипольном приближении (параметры h, g) [32], и действуют в ту же сторону, уменьшая частоты коротковолновых фононов.

Выражения для квадратов собственных частот в симметричном направлении $\mathbf{k}$ [001] с учетом всех рассмотренных трехчастичных сил приведем в безразмерных переменных Ω и $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned}\Omega_L^2 &= 2(G + H)(1 - \cos k_z) + 2(F + E)\sin^2 k_z + B\chi_{zz} + \left[A_1 - \frac{(2h + 2g)^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}} \right] (1 - \cos k_z)^2, \\ \Omega_T^2 &= (G + 2H + V_t)(1 - \cos k_z) + 2F \sin^2 k_z + B\chi_{xx} + \left[B_1 - \frac{(2h + g)^2}{A^{-1} - \varphi_{xx}} \right] (1 - \cos k_z)^2.\end{aligned}\tag{16}$$

Здесь $F = H_0(2a)$, $E = G_0(2a)$ – параметры короткодействующих сил между вторыми соседями, $B = \frac{6C}{a^5 e^2}$ (C – параметр Ван-дер-Ваальса). Для направлений [111] и [110] – аналогично (см. [32]). Параметры A_1, B_1 и др. описывают трехчастичные силы, связанные со взаимной деформацией электронных оболочек атомов в дипольном приближении, и не вносят вклада в упругие модули. Оценивать их вклад в энергию фононов в дальнейшем будем увеличив параметры g и h на 10 % для Ne, 15 % для Ar, 25 % для Kr и

30 % для Хе, подобно тому какой вклад вносят δG и δH в G_0 и H_0 , соответственно.

Далее представлены все необходимые параметры для расчета фононных частот при сжатиях от $u=0$ до $u=0.7$ ($u = \Delta V / V_0$ ($\Delta V = V_0 - V(p)$, $V_0 = V$ при $p = 0$)) и соответствующие графики для всего ряда кристаллов Ne–Хе в симметричных направлениях волнового вектора $\mathbf{k}$. Как оказалось, при $u = p = 0$ вклад трехчастичных сил можно выделить в Кг и Хе, а в Ne и Ar он практически незаметен. Наши исследования фононных частот КИГ при различных сжатиях u показало динамическую нестабильность Ne при $u = 0.8$, Ar и Кг при $u = 0.7$, Хе при $u = 0.6$ [A20]. На рисунке 1 (а, б) из наших работ [A16, A1, A2, A4] представлены фононные частоты в симметричных направлениях волнового вектора $\mathbf{k}$ в сжатых кристаллах Ne ($u=0.7$) и Хе ($u=0.5$).

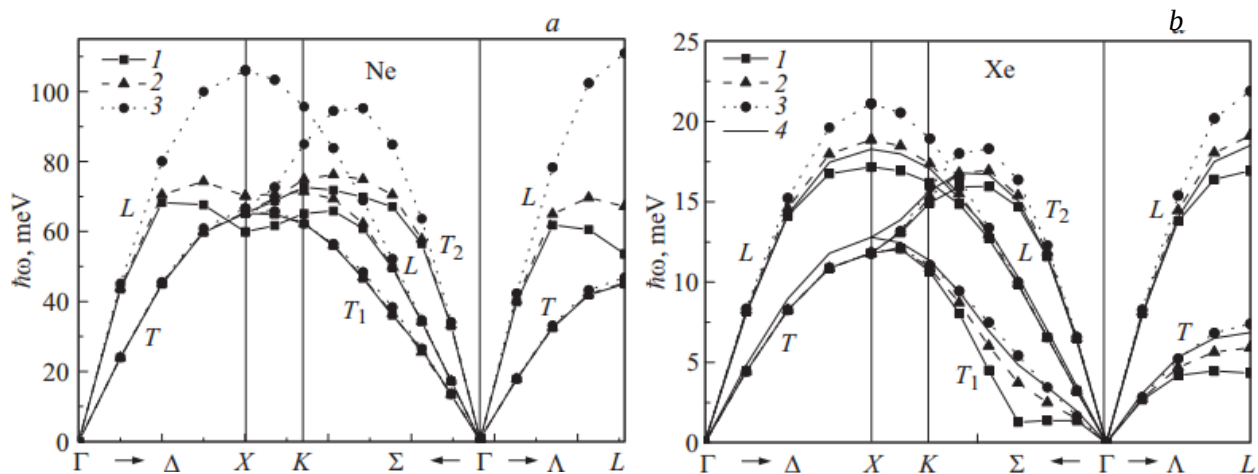


Рисунок 1 – Фононные дисперсионные кривые в симметричных направлениях волнового вектора $\mathbf{k}$ для Ne при сжатии $u=\Delta V/V_0=0,7$ (а) и для Хе при $u=0,5$ (б). 1 – наши расчеты в модели MT_2 с учетом всех рассмотренных трехчастичных сил [A16]; 2 – наши расчеты в модели MT_1 с учетом трехчастичных сил за счет перекрытия электронных оболочек [A16]; 3 – в модели MT_0 с учетом трехчастичных сил за счет перекрытия электронных оболочек, но без учета деформации электронных оболочек [A16]; 4 – расчеты с учетом деформации электронных оболочек без учета трехчастичных сил (модель $M3a$) [A1, A2, A4].

Наибольшее «размягчение» фононных частот получается при учете всех трехчастичных сил, причем для Ne «размягчаются» продольные моды в точках X и L . В Xe, наряду с указанным «размягчением», наблюдается «размягчение» поперечной моды T_1 в направлении $[110]$ и вырожденной поперечной моды в точке L .

Для нахождения фононных частот в любой точке зоны Бриллюэна необходимо диагонализировать динамическую матрицу. Поэтому для определения собственных частот $\omega_{\lambda q}$ имеются две группы уравнений:

$$M\omega^2 p_\alpha = \sum_{\beta} (A_{\alpha\beta} p_\beta + B_{\alpha\beta} P_\beta), \quad (17)$$

$$m\omega^2 P_\alpha = \sum_{\beta} (B_{\beta\alpha}^* p_\beta + C_{\alpha\beta} P_\beta), \quad (18)$$

где $\mathbf{p} = e\mathbf{u}$ – дипольный момент остовов, M – масса атома, m – масса электрона.

Тогда, как это было нами сделано в [A5], удобно ввести некоторую матрицу

$$D = \begin{pmatrix} D^1 & D^2 \\ D^2 & D^3 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

каждый элемент которой представляет собой матрицу 3×3 . Матрицу D^1 составляют элементы $A_{\alpha\beta}$ – взаимодействие фононов, $D^2 = B_{\alpha\beta}$ – электрон-фононное взаимодействие, $D^3 = C_{\alpha\beta}$ – взаимодействие электронов. Зная фононные частоты в любой точке зоны Бриллюэна можно рассчитать интегральные характеристики, такие как энергия нулевых колебаний, теплоемкость и другие термодинамические функции.

Результаты, описанные во втором разделе, позволили сформулировать первое научное положение.

В **третьем** разделе представлены наши теоретические *ab initio* исследования динамики решеток сжатых КИГ в модели деформируемых атомов, явно учитывающей деформацию электронных оболочек дипольного типа в парном приближении [A6, A7, A8]. На основе неэмпирического

короткодействующего потенциала отталкивания и интегрирования по точкам главного значения в зоне Бриллюэна рассчитываются энергия нулевых колебаний, среднеквадратичное смещение, удельная теплоемкость и температура Дебая сжатых ГЦК-Ne, Ar, Kr и Xe в гармоническом приближении.

Энергия связи E_{coh} и решеточная теплоёмкость C_V в гармоническом приближении описываются известными формулами:

$$E_{coh} = \frac{N_A \Omega}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k \hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{k}) \left[\frac{1}{2} + n_{\lambda}(\mathbf{k}) \right], \quad n_{\lambda}(\mathbf{k}) = \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{k})}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (20)$$

Здесь N_A – число Авогадро, $\Omega = 2a^3$ – объем элементарной ячейки для КИГ в ГЦК-фазе, a – параметр решетки, равный половине ребра куба.

$$C_V = \frac{R\Omega}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k \left[\left(\frac{\hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{k})}{k_B T} \right)^2 n_{\lambda}(\mathbf{k}) (n_{\lambda}(\mathbf{k}) + 1) \right], \quad (21)$$

где $k_B = 1,3806662 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, $R = k_B N_A$.

При низких температурах $T \ll \theta_D$ (θ_D – температура Дебая при $T=0$) C_V очень мала и пропорциональна T^3 . Поэтому для сравнения теории с экспериментом удобнее рассчитывать величину

$$\theta(T) = \left(\frac{12\pi^4}{5} \right)^{1/3} T \left(\frac{R}{C_V} \right)^{1/3}. \quad (22)$$

Нетрудно заметить, что при $T=0$ $\theta(0) = \theta_D$.

Среднеквадратичное смещение вдоль любой кристаллической оси в рассматриваемых кубических кристаллах равно

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\Omega \hbar^2}{(2\pi)^3 M} \sum_{\lambda} \int d^3k \frac{n_{\lambda}(\mathbf{k}) + 1/2}{\hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{k})}, \quad (23)$$

где M – масса атома. Слагаемое с $1/2$ под интегралом представляет вклад нулевых колебаний $\langle u^2 \rangle_0$. Для вычисления интегралов по зоне Бриллюэна (BZ) используем метод Чади – Коэна [33]. Сущность этого метода состоит в замене интеграла по BZ суммой значений подынтегральной функции в

особых точках (точках главного значения), найденных теоретико-групповыми методами [34]. Координаты такой точки главного значения $\mathbf{k}^*$ были найдены в [34]: $\mathbf{k}^*=[0,6223;0,2953;0]$ для ГЦК-решетки.

Вообще говоря, чтобы получить необходимую точность в расчетах, нужно знать значения искомой функции $f(\mathbf{k})$ в большом числе точек $\mathbf{k}$. В работе [33] авторы предложили метод генерирования этих точек на основе двух точек главного значения $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ для определения $f(\mathbf{k})$ в кристалле:

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{4}[3f(\mathbf{k}_1) + f(\mathbf{k}_2)], \quad \mathbf{k}_1 = \left[\frac{3}{4}; \frac{1}{4}; \frac{1}{4}\right], \quad \mathbf{k}_2 = \left[\frac{1}{4}; \frac{1}{4}; \frac{1}{4}\right] \quad (24)$$

Точки $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ используются в [33] для генерирования десяти устойчивых точек главного значения, по которым среднее $f(\mathbf{k})$ по зоне определяется с высокой степенью точности. Тогда энергия нулевых колебаний будет

$$E_{zp} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda,i} \hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{k}_i). \quad (25)$$

В [А6, А7] нами представлена E_{zp} для Ne, Ar, Kr и Xe при различных степенях сжатия, рассчитанная без учета деформации электронных оболочек атомов (модель М3) и с учетом деформации электронных оболочек дипольного типа в парном приближении (модель М3а). Анализ полученных результатов показал, что вклад деформации электронных оболочек в легких КИГ (Ne и Ar) незначителен и замечен в Ne при сжатии 0.6, а в Ar – при 0.7. В случае тяжелых КИГ (Kr и Xe) этот вклад мал в Kr и практически не влияет на E_{zp} для Xe. Как нам известно, экспериментальные значения E_{zp} при $p=0$ измерены для ряда Ne–Kr [37, 38]. Рассчитанные нами [А7] для Ne $E_{zp}=83,8\pm 2,5$ К, для Ar $E_{zp}=97,7\pm 0,7$ К (в зависимости от модели и схемы расчета).

Экспериментальная энергия нулевых колебаний для Ne $E_{zp}=78,5$ К [37], для Ar $E_{zp}=86,1\pm 2,5$ К [38], то есть погрешность измерения составляет 3 %. Погрешность наших расчетов по сравнению с экспериментальным значением составляет 7 % и 13 % для Ne и Ar, соответственно. Рассчитанные нами для

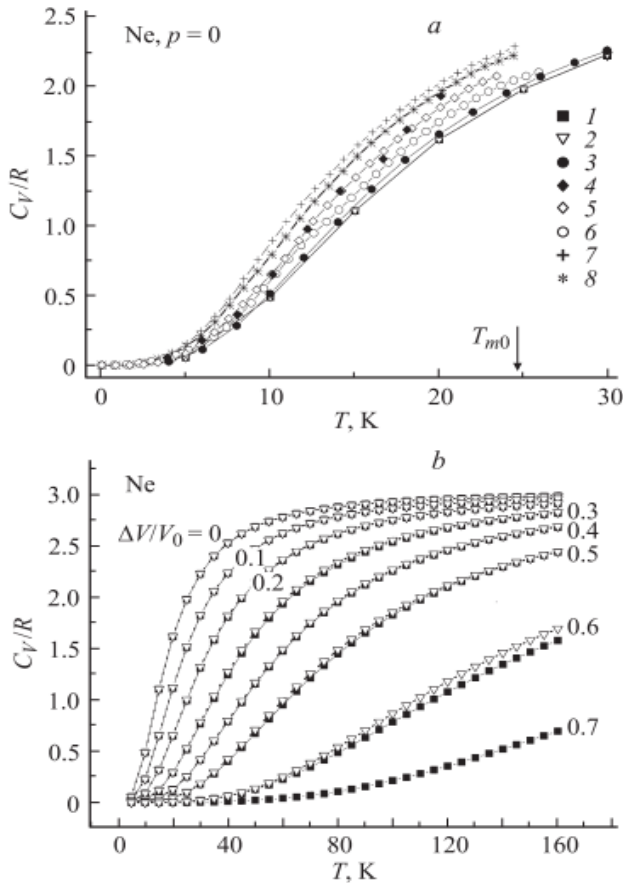


Рисунок 2 – Температурная зависимость теплоемкости $C_V(T)$ Ne: *a* – при нулевом давлении, *b* – при различных сжатиях от 0 до 0.7. 1-3 – наши расчеты [A7] в модели *M3* (без учета деформации электронных оболочек), в модели *M3a* (с учетом деформации электронных оболочек дипольного типа) и в модели *M5* ($V_{sr}\sim S^n$), соответственно. Эксперимент: 4 – данные [35], 5 – [36].

6 – расчет [39], 7 и 8 – расчет [40] с потенциалами Леннард-Джонса и расширенным потенциалом Леннард-Джонса, соответственно. Температура плавления $T_{m0}=24.6$ К при $p=0$ показана стрелкой. На *b* квадраты – наши расчеты в модели *M3*, треугольники – в модели *M3a*.

Kr $E_{zp}=74,0\pm 0,5$ К (в зависимости от модели и схемы расчета) [A6]. Экспериментальная энергия нулевых колебаний для Kr $E_{zp}=67,4\pm 3$ К [38], то есть погрешность измерения составляет 4 %. Погрешность наших расчетов по сравнению с экспериментальным значением составляет около 10 %.

Далее представлены температурные зависимости решеточной теплоемкости $C_V(T)$ для Ne, Ar, Kr и Xe при разных давлениях (сжатиях). На рисунке 2 (*a*), приведены экспериментальные зависимости теплоемкости C_V от T для Ne при нулевом давлении – как пересчитанные по значениям C_p , так и измеренные непосредственно; кроме того, представлены наши результаты, полученные по формуле (21), а также теоретические результаты других авторов. Поскольку $C_V(T)$ однозначно определяется фононным спектром во

всей ВЗ, ясно, что лучшее согласие с экспериментом по теплоемкости должны давать теории, наиболее точно описывающие фононный спектр. Поэтому не удивительно, что теория Толпыго (модель М1) [39], параметры которой определялись из минимума среднеквадратичного отклонения для $\omega_{\text{лк}}$ (в симметричных направлениях, так как других экспериментальных точек нет), приводит к хорошему согласию с экспериментом. Этого явно недостаточно для хорошего воспроизведения фононных частот. Из рисунка 2 видно, что до $T = 10$ К все теоретические расчеты близки между собой и хорошо согласуются с экспериментом. В представленной к защите диссертации показано, что вклад деформации электронных оболочек дипольного типа в Ne меньше, чем в Ar, но больше, чем в Kr и замечен при сжатии $u=0,6$, причем в том температурном интервале пока C_V еще не подошла к значению $2,9R$.

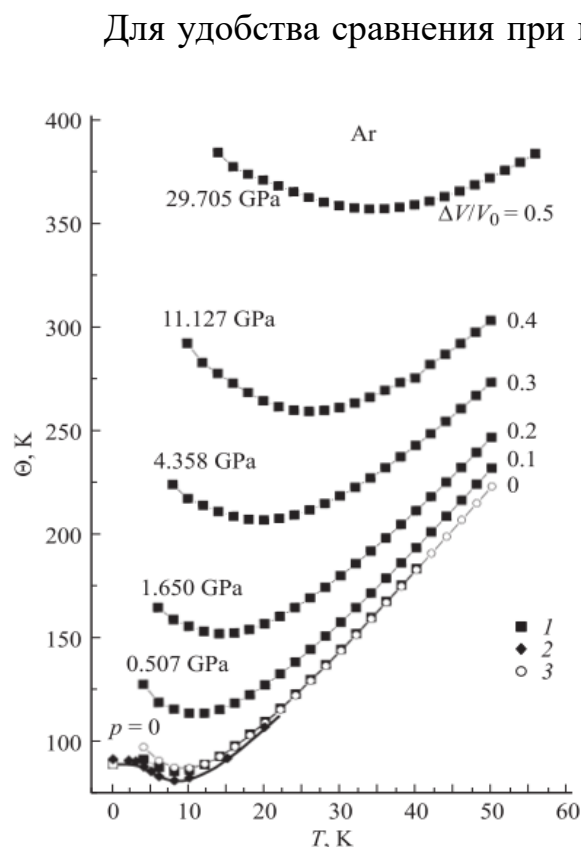


Рисунок 3 – Температурная зависимость $\theta(T)$ Ar при различных давлениях. 1 – наши расчеты в модели М3а [А7]; 2 – эксперимент [41,42]; 3 – расчет [39].

разделе диссертации для всех КИГ приведены значения температурной зависимости $\theta(T)$ температуры Дебая, полученные по формуле (22). Сопоставление расчетных значений $\theta(T)$ при нулевом давлении с экспериментальными данными показывает правильность общего хода этой величины в достаточно широком температурном интервале 0–20 К. Это свидетельствует о том, что теория правильно передает значения $\omega_{\text{лк}}$ в начальном участке кривых, в первую очередь для поперечных (низких) частот.

Кроме перечисленных выше параметров третий раздел диссертации содержит таблицы с характеристиками нулевых и тепловых колебаний КИГ при $p=0$: энергию нулевых колебаний E_{zp} , среднеквадратичные смещения при $T=0$ и $T=T_{m0}$, параметр Линдемана $\delta(T_{m0})$, равный отношению среднеквадратичного смещения вдоль одной из осей куба к половине межатомного расстояния в точке плавления при $p=0$:

$$\delta(T_{m0}) = \left[\frac{2 \langle u^2(T_{m0}) \rangle}{3 a^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (26)$$

и вклад в него нулевых колебаний.

Значения энергии нулевых колебаний E_{zp} и среднеквадратичного смещения $\langle u^2 \rangle_0$ находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными работ [37,38] и расчетами в модели M1 [39]. Кроме того, значения $\langle u^2 \rangle_0$ хорошо согласуются с вычисленными в модели Дебая (см. [43], С. 158]) для всех кристаллов, за исключением Ne. Температурные зависимости $\langle u^2(T) \rangle$ для Ne, Ar, Kr, Xe при различных сжатиях также представлены в тексте диссертации. К сожалению, отсутствие экспериментальных данных не позволяет проверить нашу модель на описание температурной зависимости $\langle u^2(T) \rangle$ даже при $p=0$.

Результаты, описанные в третьем разделе, позволили сформулировать второе научное положение.

В четвертом разделе потенциальная энергия решетки U с учетом деформации электронных оболочек атомов квадрупольного типа получена нами [A11] из среднего гамильтониана электронной подсистемы $\bar{H}$ в виде

$$U = \min \bar{H} = const + \sum_l \left\{ \frac{(\mathbf{P}^l)^2}{2\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{2\beta_{44}} (Q_{\alpha\beta}^l)^2 + \boldsymbol{\beta}^l \cdot \mathbf{P}^l + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D_{\alpha\beta}^l Q_{\alpha\beta}^l - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{l'} \left[\frac{C}{|\mathbf{r}^{ll'}|^6} + \frac{C'}{|\mathbf{r}^{ll'}|^8} + \frac{C''}{|\mathbf{r}^{ll'}|^{10}} \right] + \frac{1}{2} \sum_{l'} K(\mathbf{P}^l, Q_{\alpha\beta}^l, \mathbf{P}^{l'}, Q_{\alpha\beta}^{l'}) + \frac{1}{2} \sum_{l'}^{n.n.} U_{sr}(|\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{l'}|) \right\}. \quad (27)$$

Первые четыре члена представляют деформацию электронной оболочки. Следующие три члена – ван-дер-ваальсовы силы; K – это в классическом смысле кулоновское взаимодействие между всеми диполями и квадрупольями, действующими друг на друга. Последнее слагаемое – короткодействующие силы.

Как уже было сказано, достаточно сложное выражение для U (27) можно упростить в гармоническом приближении, учитывая сферическую симметрию электронных оболочек атомов [28]. Определим безразмерную дипольную поляризуемость $A = \alpha / a^3$ (a – половина ребра куба). Коэффициенты квадрупольной поляризуемости $\beta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ представляют собой тензор 4 ранга. В случае кубических кристаллов он имеет всего две независимых составляющих $\beta_{1111} = -2\beta_{1122}$ и $\beta_{1212} \equiv \beta_{44}$. Для сферически-симметричных атомов они относятся как 4/3 [26]. Введем безразмерную величину $b = (2/a^5)\beta_{44}$. Тензор $D_{\alpha\beta}^l$ в гармоническом приближении, с учетом симметрии окружения, также выражается всего через два независимых параметра, которые мы обозначим через W и V . $D_{\zeta\zeta}^l$ – диагональная компонента тензора $D_{\alpha\beta}^l$, когда ось x выбрана вдоль направления $[110]$ на ближайшего соседа. Члены короткодействия выражаются через два параметра H и G , а слагаемые $\boldsymbol{\beta}^l \mathbf{P}^l$ выражаются через параметры g и h :

$$\left. \begin{aligned} U &= \frac{1}{e} \left[\frac{a}{\sqrt{2}} \frac{dD_{\zeta\zeta}(r)}{dr} \Big|_{r_0} - D_{\zeta\zeta}(r_0) \right]; \quad W = \frac{1}{e} \left[\frac{a}{\sqrt{2}} \frac{dD_{\zeta\zeta}(r)}{dr} \Big|_{r_0} + D_{\zeta\zeta}(r_0) \right]; \\ G &= \frac{2a^3}{e^2} \left[\frac{d^2 U_{sr}}{dr^2} \Big|_{r_0} - \frac{1}{r_0} \frac{dU_{sr}}{dr} \Big|_{r_0} \right]; \quad H = \frac{4a^3}{e^2} \frac{1}{r_0} \frac{dU_{sr}}{dr} \Big|_{r_0}; \quad R = \frac{8C'}{a^7 e^2}; \quad S = \frac{10C''}{a^9 e^2}; \\ h &= \frac{2\sqrt{2} \cdot \beta(r_0) \cdot a^2}{e}; \quad g = \frac{2a^3}{e} \frac{d\beta}{dr} - \frac{h}{2}, \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

$r_0 = a\sqrt{2}$ – равновесное расстояние между ближайшими соседями.

Для симметрии вместо смещений и квадрупольных моментов $\mathbf{p}^l = e\mathbf{u}^l$, $q_{\alpha\beta}^l = Q_{\alpha\beta}^l / a$ введём величины размерности диполей. В гармоническом приближении выражения для модулей упругости Бирча с учетом рассмотренных трехчастичных сил и квадрупольной деформации электронных оболочек, примут вид:

$$\begin{aligned} B_{11} &= \frac{e^2}{2a^4} \left[G + H + 2F + 2E - \frac{2}{3}V_q - 0.980677B \right], \\ B_{12} &= \frac{e^2}{2a^4} \left[\frac{1}{2}G - H - 2F + \frac{1}{3}V_q - \frac{1}{2}V_t - 0.864715B \right], \\ B_{44} &= \frac{e^2}{2a^4} \left[\frac{1}{2}G + H + 2F - \frac{1}{2}T + \frac{1}{2}V_t - 0.26247B \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

Параметры квадрупольного взаимодействия V_q , T и безразмерная поляризуемость b имеют вид:

$$V_q = \frac{b(2W - U)^2}{1 + 0.32673 \cdot b}; \quad T = \frac{8bW^2}{1 - 0.0661 \cdot b}; \quad b = \frac{2\beta_{44}}{a^5}. \quad (30)$$

Таким образом, отклонение от соотношения Коши, в случае его представления с помощью параметров 3-частичного взаимодействия и квадрупольной деформации, записывается как:

$$\delta = B_{12} - B_{44} - 2p = \frac{e^2}{2a^4} [\delta_t + \delta_q]; \quad \delta_t = \frac{e^2}{2a^4} [2\delta H - V_t - 4R_t]; \quad \delta_q = \frac{1}{2}T + \frac{1}{3}V_q. \quad (31)$$

Из общих соображений трудно оценить величину и знак δ_t , и, следовательно, общую величину отклонения от соотношения Коши δ (31);

конкретные расчеты для Ne, Ar, Kr и Xe индивидуально, дают отдельную зависимость $\delta(p)$ для каждого из них.

На примере Ne нами была рассмотрена [A12] модель расчета зависимости параметров квадрупольной деформации V_q, T от сжатия, которая определяется матричным элементом $\langle i0 | H_{sr}^{II'} | 00 \rangle$. На основе определения (29) можно положить $T \approx 8V_q$. Тогда в приближении Хартри – Фока отклонение от соотношения Коши за счет квадрупольной деформации электронной оболочки δ_q примет вид:

$$\delta_q(p) = \frac{13}{3} \frac{e^2}{2a^4} V_q(p); \quad V_q(p) = A_i V_q^0 \frac{S^2 / |\mathbf{r}^{II'}|}{S_0^2 / (a_0 \sqrt{2})}. \quad (32)$$

Здесь через V_q^0 обозначен параметр квадрупольной деформации электронной оболочки, через S_0 – интеграл перекрытия в отсутствии давления; A_i – некий коэффициент порядка единицы.

До настоящего момента рассматриваемая теория не включала подгоночные параметры, поскольку все параметры двух- и трехчастичного взаимодействий ($H_0, G_0, F, E, \delta H, \delta G, V_t, R_t$) могут быть рассчитаны отдельно для каждого кристалла серии Ne–Xe с достаточной точностью.

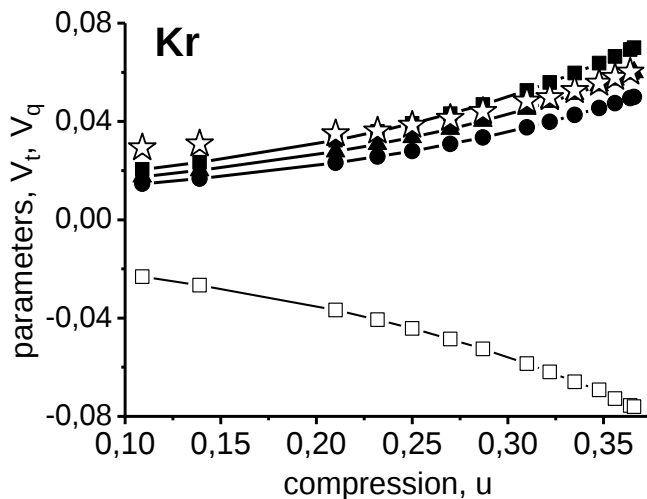


Рисунок 4 – Зависимость трехчастичного параметра V_t (14) и квадрупольного параметра V_q при различных коэффициентах A_i (32) от сжатия для Kr. Заполненные квадраты, треугольники и круги соответствуют рассчитанным квадрупольным V_q с коэффициентами $A_i = 0.7, 0.6, 0.5$; пустые квадраты – трехчастичный параметр V_t (14); звездочки – экспериментальные данные V_q^{exp} .

Для квадрупольного параметра V_q мы нашли функциональную зависимость, а начальное значение параметра $V_q(p \approx 0)$ мы предлагаем взять из экспериментального δ_{exp}^0 в первой экспериментальной точке давления ($V_q^0 = V_q^{\text{exp}}(0)$). Рассчитаны параметры V_q в зависимости от сжатия для всего ряда Ne–Xe при разных A_i . Для дальнейших расчетов выбраны лучшие A_i : $A_i=0,5$ для Ne, $A_i=0,1$ для Ar, $A_i=0,6$ для Kr и $A_i=0,45$ для Xe и показаны (рисунок 4) рассчитанные нами [A14] параметры трехчастичного и квадрупольного взаимодействий для Kr.

Рассчитанные нами в [A12, A13] модули упругости Бирча для Ne хорошо согласуются с экспериментальными. Для сдвиговых модулей B_{12}^0 и B_{44}^0 учет B_{44}^t и B_{44}^q делает результат лучше. Для модуля B_{11}^0 рассматриваемый вклад не особо заметен.

Как показано далее, наши рассчитанные модули упругости B_{ij} при больших давлениях хорошо согласуются с расчетами на основе эмпирических потенциалов EAM (embedded atom method) [8]. На рисунке 5 показана барическая зависимость отклонения от соотношения Коши для неона.

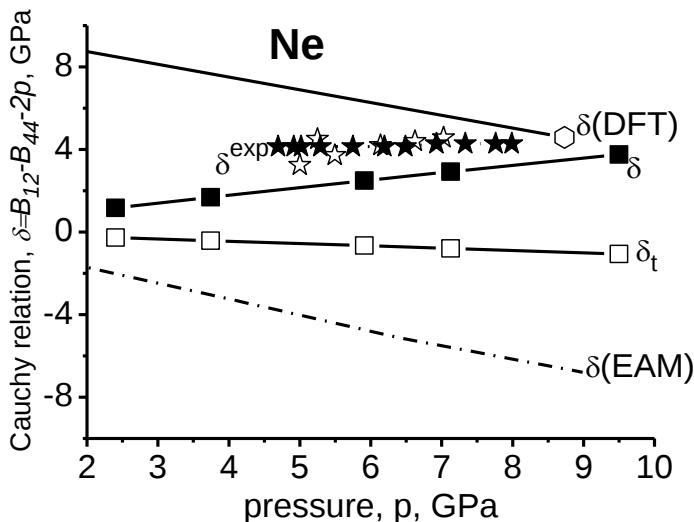


Рисунок 5 – Отклонения от соотношения Коши $\delta(p)$ для Ne в зависимости от давления. Сплошные квадраты – наши расчеты с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий [A18]; полые квадраты – наши расчеты с учетом трехчастичного взаимодействия [A18]; штрихпунктирная линия – теоретические исследования в EAM [8] и полный пятиугольник – *ab initio* расчеты в DFT [14]. Сплошные звезды – среднее значение эксперимента [19]; полые звезды – экспериментальные данные [44].

Учет квадрупольного взаимодействия приводит к правильному отображению функциональной зависимости $\delta(p)$ и улучшает согласие с экспериментальными данными, делая $\delta > 0$. Такое положение вещей способствовало существенному различию наших результатов от результатов иных авторов, в том числе *ab initio* расчеты в DFT и на основе эмпирических потенциалов.

Ab initio исследования упругих свойств ГЦК-Ne в широком диапазоне сжатия вплоть до металлизации ($u = 0.77$) обосновывают использование приближений для расчета параметров квадрупольной деформации.

Близость наших расчетов V_q при различных A_i к V_q^{exp} демонстрирует устойчивость модели и контролируемость сделанных приближений.

В пятом разделе в модели деформируемых и поляризуемых атомов исследуются упругие свойства сжатых кристаллов инертных газов Ne, Ar, Kr и Xe. Рассчитаны модули упругости Фукса второго порядка и их производные по давлению, коэффициент упругой анизотропии Зенера с учетом трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек квадрупольного типа в широком интервале давлений, а также соотношения Коши для всего ряда Ne-Xe. Проведено сравнение с экспериментом и результатами расчетов других авторов.

Преобразуем выражение для модулей упругости Бирча (28), отдельно выделив вклады от парного B_{ij}^0 , трехчастичного взаимодействия B_{ij}^t и квадрупольного взаимодействия B_{ij}^q :

$$\begin{aligned}
 B_{ij} &= B_{ij}^0 + B_{ij}^t + B_{ij}^q, \\
 B_{11}^t &= K(p)(\delta G + \delta H), \quad B_{11}^q = K(p)\left(-\frac{2}{3}V_q\right), \quad K(p) = \frac{e^2}{2a^4}, \\
 B_{12}^t &= K(p)\left[\frac{\delta G}{2} - \frac{V_t}{2} - \delta H\right], \quad B_{12}^q = K(p)\left(\frac{1}{3}V_q\right), \\
 B_{44}^t &= K(p)\left[\frac{\delta G}{2} + \frac{V_t}{2} + \delta H\right], \quad B_{44}^q = -K(p)(4V_q).
 \end{aligned} \tag{34}$$

Анализ [A17] численных значений параметров и выражения (34) показал, что вклад B_{11}^t в значительной степени компенсируется вкладом B_{11}^q , а $B_{11} \approx B_{11}^0$. Главное отличие B_{12} от B_{12}^0 обуславливается вкладом трехчастичного взаимодействия B_{12}^t , который положителен. Вклад в сдвиговый модуль B_{44} от квадрупольной деформации электронной оболочки атома $B_{44}^q < 0$ и значительно больший, чем B_{44}^t ($|B_{44}^q| > |B_{44}^t|$). Сравнительные значения вкладов B_{ij}^t , B_{ij}^q увеличиваются для серии Ne, Ar, Kr и Xe.

Рисунок 6 представляет результирующие вклады в модули упругости Бирча B_{ij} трехчастичного и квадрупольного взаимодействий на примере Kr. Согласие теории и эксперимента для модулей упругости хорошее. Для больших деформаций, например всестороннего сжатия, одноосного сжатия и сдвигов, вместо модулей Бирча B_{ij} удобно использовать модули Фукса V_{ij} , которые являются производной от свободной энергии по параметрам деформации.

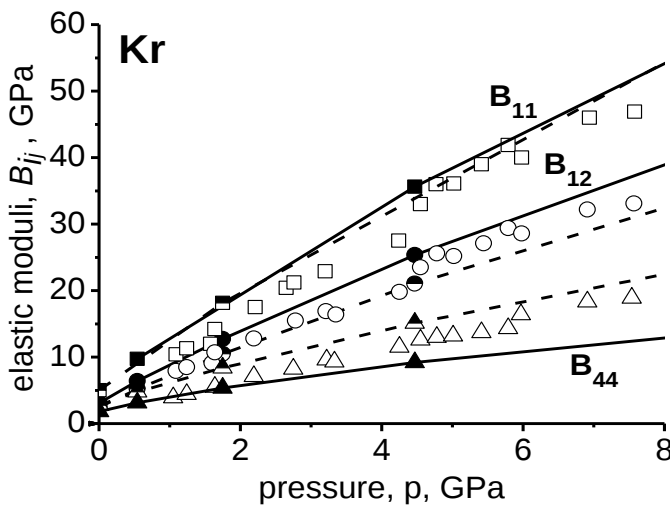


Рисунок 6 – Зависимость упругих модулей Бирча B_{ij} от давления для криптона. Заполненные символы – наш расчет с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий (34) [A18]; полузаполненные символы – расчеты B_{ij}^0 с парным потенциалом [A3]; пустые символы – эксперимент [45].

Тогда их можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} B_{ij} &= B_{ij}^0 + B_{ij}^t + B_{ij}^q; \\ B_{11}^t &= \frac{1}{3} K(p) [2\delta G - \delta H - V_t], \quad B_{11}^q = 0, \quad K(p) = \frac{e^2}{2a^4}, \\ B_{33}^t &= \frac{1}{4} K(p) [\delta G + 4\delta H + V_t], \quad B_{33}^q = K(p) \left[-\frac{1}{2} V_q \right], \\ B_{44}^t &= \frac{1}{2} K(p) [\delta G + 2\delta H + V_t], \quad B_{44}^q = K(p) [-4V_q], \end{aligned} \quad (35)$$

B_{ij}^0 – рассчитанные нами ранее модули упругости Фукса с парным потенциалом в моделях $M1$, $M3$ и $M5$ [A3].

Модель $M5$ использует точную формулу для расчета короткодействующей части потенциала отталкивания для квадратичной поправки W_2 [46] $V_{sr} = E^{(0)} + W_2(S^n)$, в модели $M3$ и модели $M1$ квадратичная поправка W_2 вычисляется в приближении S^2 . Кроме того, в моделях $M3$ и $M5$ константа Ван-дер-Ваальса $C \rightarrow C(1 - Ae^{-\beta r})$ была переопределена, и теперь при расчете сил короткодействия учитываются «вторые» соседи [A3]. В простейшей модели $M1$ $A = \beta = 0$ и рассматриваются только первые соседи.

На рисунке 7 [45, 47] показаны рассчитанные [A19] модули Фукса B_{ij} в зависимости от сжатия для неона, аргона, криптона и ксенона с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий. Как видно из рисунка 7 (a), согласие между теоретическими и экспериментальными величины B_{11} [47] адекватное. Поэтому, для базовой модели Ne следует использовать модель $M5$ [A3], для Ar – $M1$, а для тяжелых Kr и Xe – $M3$ [A3]. Наблюдается явная тенденция отклонения теории (расчеты по моделям $M3$ и $M5$) от эксперимента, при этом теоретический модуль B_{11} немного выше экспериментальной кривой для всей серии Ne–Xe.

В ряду Ne, Ar, Kr и Xe, не смотря на нарушение монотонности (рисунок 7, b), зависимость B_{33} от сжатия такая же, как и $B_{11}(u)$.

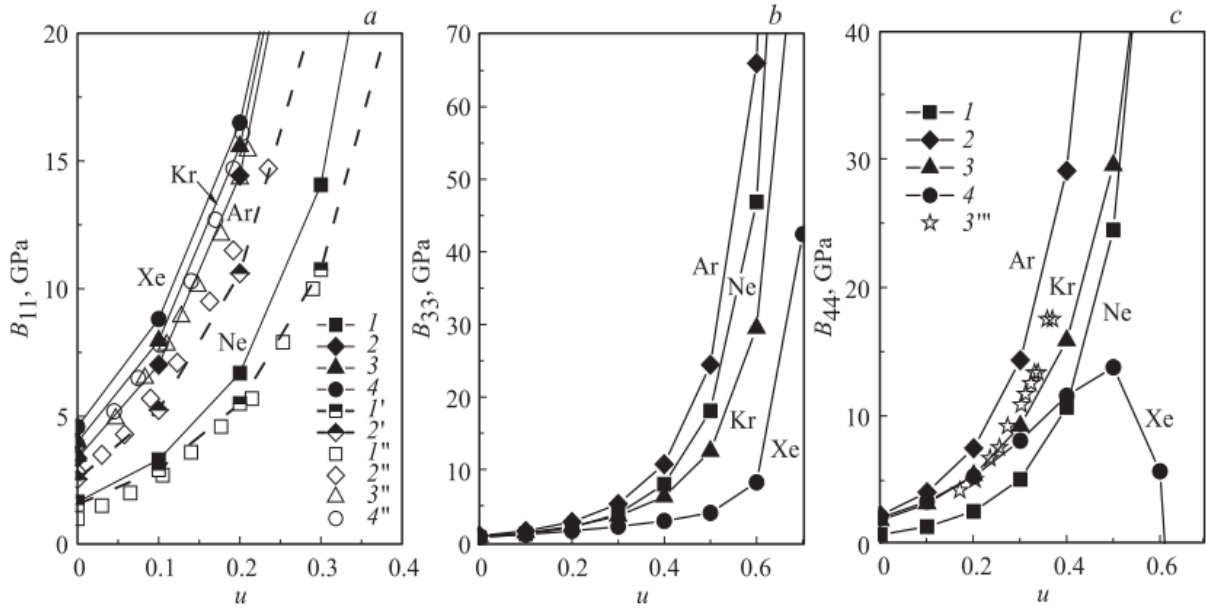


Рисунок 7 – Барические зависимости модулей упругости Фукса второго порядка B_{11} (a), B_{33} (b), B_{44} (c) для Ne (1), Ar (2), Kr (3) и Xe (4). 1-4 – наш расчет [A19] B_{11} с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий $B_{11} = B_{11}^0 + B_{11}^t + B_{11}^q$ (35), где $B_{11}^0(p)$ рассчитывается в модели M3; 1' – расчеты на основе $B_{11}^0(M5)$ для Ne; 2' – расчеты на основе $B_{11}^0(M1)$ для Ar; 1''-4'' – эксперимент [47]; 3''' – эксперимент [45] для Kr.

В Хе сдвиговой модуль B_{44} уменьшается до нуля при сжатии $u = 0.6$. Это свидетельствует о возникновении решеточной неустойчивости и говорит о фазовом переходе. Фактически этот переход экспериментально был обнаружен в [48]. Это переход от промежуточной плотноупакованной фазы к ГПУ-фазе при 75 GPa непосредственно перед тем, как происходит металлизация при $u = 0,65$ (132 GPa) [49]. Модули упругости высших порядков содержат более высокие (чем вторая) пространственные производные энергии связи. Из-за резкого изменения межатомного потенциала с расстоянием модули упругости Фукса третьего порядка B_{ikl} значительно больше модулей упругости второго порядка B_{ik} и могут служить хорошим тестом применимости той или иной теории.

В случае кубического кристалла существует один модуль первого порядка ($B_1 = -p$), три модуля второго порядка B_{ik} и шесть модулей

третьего порядка B_{ikl} (см., например, [50] С. 51). Три модуля B_{111} , B_{133} , B_{144} можно найти из измерений (расчетов) величин dB_{ik}/dp при $p = 0$, с которыми они связаны соотношениями

$$\begin{aligned} B_{111} &= -B \left(\frac{dB_{11}}{dp} + 1 \right), \\ B_{133} &= C' - B \frac{dB_{33}}{dp}, \\ B_{144} &= \frac{1}{3} C_{44} - B, \end{aligned} \quad (36)$$

где B – объемный модуль (bulk modul)

$$B = (C_{11} + 2C_{12}) / 3 = B_{11} - \frac{1}{3} p, \quad (37)$$

C' – сдвиговый модуль

$$C' = (C_{11} - C_{12}) / 2 = B_{33} - p, \quad (38)$$

$$\frac{dB_{11}}{dp} = \frac{dB}{dp} + \frac{1}{3}; \quad \frac{dB_{33}}{dp} = \frac{dC'}{dp} - 1; \quad \frac{dB_{44}}{dp} = \frac{dC_{44}}{dp} - 1. \quad (39)$$

В диссертации приведены рассчитанные нами в модели деформируемых атомов с учетом трехчастичного взаимодействия первые производные по давлению от объемного и сдвиговых модулей dB_{ik}/dp и модули упругости Фукса третьего порядка B_{ikl} (36) при $p = 0$, результаты других авторов [9, 51] и эксперимент [52].

Чтобы сравнить наши результаты расчетов B_{ikl} с результатами расчетов C_{ikl} из работы [51], мы воспользовались следующими соотношениями, справедливыми при $p = 0$ (см., например, [50], С. 51):

$$\begin{aligned} B_{111} &= -B + \frac{1}{9} (C_{111} + 6C_{112} + 2C_{123}); \\ B_{133} &= B + \frac{4}{3} C' + \frac{1}{6} (C_{111} + C_{123}); \\ B_{144} &= B + \frac{2}{3} C_{44} + \frac{1}{3} (C_{144} + 2C_{166}). \end{aligned} \quad (40)$$

В диссертации показано, что наш расчет dB/dp очень хорошо согласуется с экспериментом [52] для Ar–Xe (погрешность $\sim 3\%$) и

несколько хуже – для Ne. Результаты расчетов dB/dp [9] и [51] на основе эмпирического потенциала Лундквиста согласуются с экспериментом [52] хуже, чем наши. Для производных по давлению от двух сдвиговых модулей экспериментальных значений, к сожалению, нет, результаты наших расчетов значительно отличаются от результатов других авторов, особенно, для dC_{44}/dp . Модули упругости третьего порядка B_{ikl} , определяемые производными по давлению от модулей упругости второго порядка dB_{ik}/dp демонстрируют то же поведение. Лучше всего наши расчеты B_{111} согласуются (с точностью до 5 %) с расчетами Лехри и Верма [51]. Исключение составляет только Kr, для которого относительная погрешность $\gamma^{Kr} = 14\%$. Наш расчет B_{133} в легких кристаллах ложится в интервал между расчетами [51], полученных в двух различных моделях, а в Kr и Xe он несколько ниже, как и в случае B_{144} для всех КИГ.

Анизотропия является следствием того, что расстояния и силы связи между атомами различаются в кристаллических структурах по разным направлениям и тем более выражена, чем хуже симметрия кристалла. Количественно упругая анизотропия оценивается по максимальной разнице в упругих модулях. Таким образом, коэффициент упругой анизотропии кубических кристаллов представляет собой отношение двух модулей Фукса $A_z = B_{44}/B_{33}$. Кроме того, $A_z = 1$, если материал изотропный.

Модуль B_{44} имеет отношение к сдвигу в любом направлении по плоскости (100), а модуль B_{33} – к сдвигу через плоскости (110) в направлении $[1\bar{1}0]$. В последнем разделе диссертации A_z представляется функцией от давления для неона, аргона, криптона и ксенона. Общей чертой экспериментальных результатов для серии Ne–Xe [19, 44, 45, 53, 54] является то, что коэффициент упругой анизотропии Зенера уменьшается с ростом давления и стремится к изотропному пределу $A_z = 1$. Однако, как указывалось в [9, 55], для кристаллов инертных газов теоретическая упругая

анизотропия характерно увеличивается с ростом давления, что не согласуется с имеющимися экспериментальными сведениями. Расчетные результаты для коэффициента упругой анизотропии Зенера в широком диапазоне давления (сжатия) приведены в пятом разделе диссертации. Как и в других теоретических исследованиях [9, 53, 55], нами полученные значения A_z (например, рисунок 8 для Ar) постепенно возрастают до определенного сжатия. Однако в нашем исследовании, в отличие от этих исследований, в более легких кристаллах Ne и Ar начиная со сжатия $u = 0.6$, в Kr – со сжатия $u = 0.4$ и в Xe – со сжатия $u = 0.5$, наблюдается уменьшение A_z и тенденция к изотропному пределу $A_z = 1$, соответствующему эксперименту.

Анализ показывает, что достаточное согласие с экспериментом по модулям Бирча B_{ij} может быть получено как с помощью *ab initio* расчетов, так и с помощью эмпирических потенциалов. Кроме того, отклонение от соотношения Коши не зависит от параметров двухчастичного потенциала.

Достаточно точное воспроизведение зависимости $\delta(p)$ для каждого из кристаллов неона, аргона, криптона и ксенона позволяет обнаружить в них

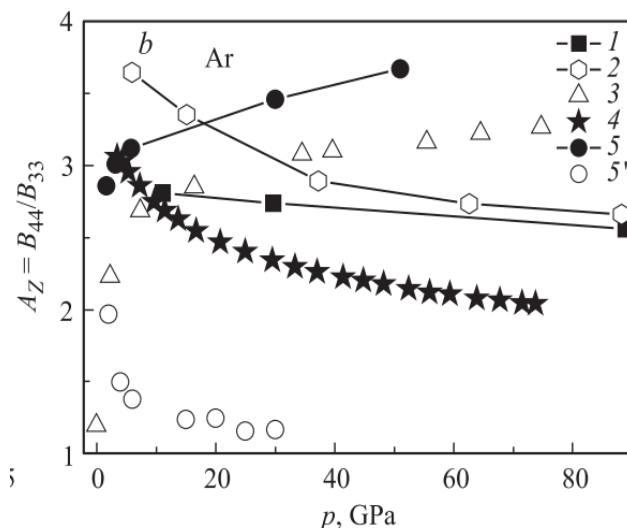


Рисунок 8 – Барические зависимости коэффициента упругой анизотропии Зенера $A_z(p)$ для Ar. 1 – наш расчет [A19] с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий; 2 – расчет в DFT [14]; 3 – расчет A_z , полученный в работе [9]; 4 – эксперимент [54]; 5 – теоретический расчет $A_z(p)$, полученный в работе [53]; 5' – эксперимент там же.

наиболее важные взаимодействия, а также является главным аспектом верности построения теории упругих свойств сжатых кристаллов инертных газов.

Сводный рисунок 9, полученный нами в [A18], с учетом результатов работ [8, 14, 19, 44, 45, 54], представляет собой барическую зависимость отклонения от соотношения Коши $\delta(p)$ серии Ne–Xe. Учет только трехчастичного взаимодействия (рисунок 9, а) приводит к соотношению $\delta_t^{Ne} > \delta_t^{Ar} > \delta_t^{Kr} > \delta_t^{Xe}$, как в расчетах DFT [14] и не воспроизводит наблюдаемую на эксперименте зависимость $\delta_{Ne} > \delta_{Kr} > \delta_{Xe} > \delta_{Ar}$ [19].

В наших расчетах зависимости от давления отклонения от соотношения Коши кристаллических криптона и ксенона находятся между зависимостями от давления легких кристаллов неона и аргона [19] (рисунок 9, b). Это связано с тем, что для правильного описания

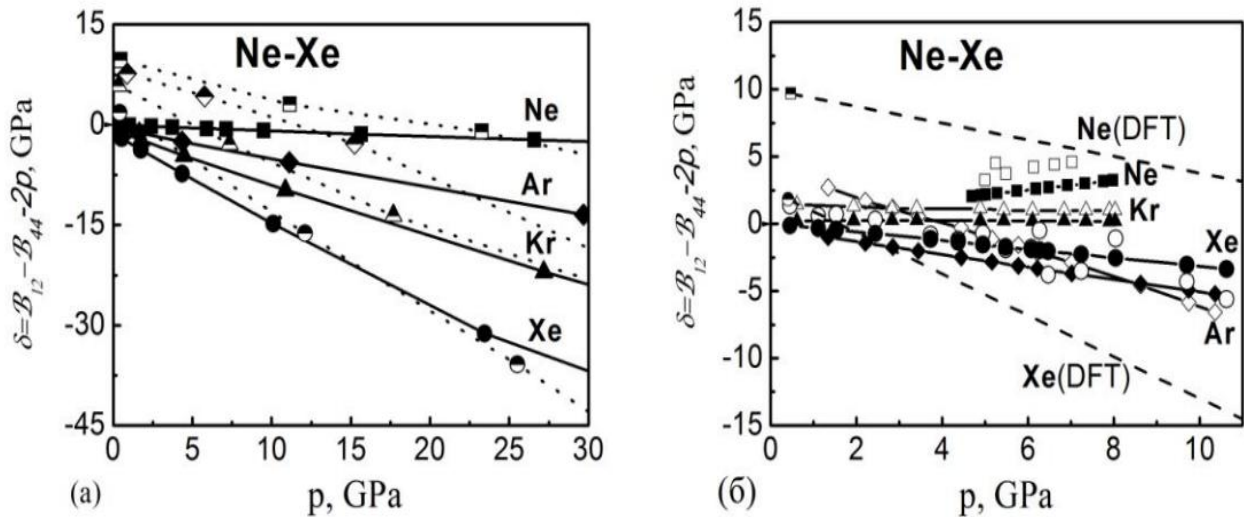


Рисунок 9 – Барическая зависимость отклонения от соотношения Коши для Ne, Ar, Kr и Xe. (a) сплошные символы – наши расчеты $\delta(p) = \delta_t(p)$ без учета квадрупольного взаимодействия, полузаполненные символы – *ab initio* исследования в DFT [14]; (b) сплошные символы – наши расчеты [A18] $\delta(p) = \delta_t(p) + \delta_q(p)$; полые символы – экспериментальные данные $\delta(p)$ для Ne [44], Ar [54], Kr [45] и Xe [19]; оставшиеся обозначения такие же, как на части (a).

экспериментальной зависимости $\delta(p)$ Ne, Kr и Xe в квадрупольном приближении необходимо также учесть искажение электронной оболочки.

Зависимость отклонения от соотношения Коши δ от давления обусловлена двумя конкурирующими взаимодействиями (многочастичным и квадрупольным), возникающими из-за деформации электронной оболочки атомов при смещении ядра; для Ne, Kr и Xe вклад этих взаимодействий сильно компенсируется, что хорошо согласуется с экспериментом, а зависимость от давления $\delta(p)$ слаба.

Результаты, описанные в пятом разделе, позволили сформулировать третье, четвертое и пятое научные положения, выносимые на защиту.

В Заключение приведены основные результаты и выводы.

Общий подход к построению адиабатического потенциала U серии Ne–Xe может выявить важнейшие взаимодействия в них, то есть межатомный потенциал. Адиабатический потенциал, полученный в предположении парного межатомного взаимодействия, обобщается на случай n -атомных взаимодействий. В рамках развитой теории многочастичное взаимодействие в короткодействующем потенциале отталкивания и эффекты деформации электронных оболочек атомов в дипольном и квадрупольном приближениях рассчитываются индивидуально для каждого кристалла ряда Ne–Xe в широком интервале давления, что дает возможность сформулировать шестое научное положение, выносимое на защиту.

Итогом работы можно считать следующие результаты:

1. Проведено *ab initio* исследование многочастичного взаимодействия, связанного не только с перекрытием, но и с деформацией электронных оболочек атомов дипольного типа в потенциале короткодействия.

2. Предложена простая форма трехчастичного взаимодействия, основывающаяся на *ab initio* расчетах короткодействующего отталкивания не выходя за рамки метода Хартри-Фока, которая не имеет вариационных и подгоночных параметров.

3. Выявлено, что учет эффектов деформации электронных оболочек атомов в дипольном приближении при расчете фононных частот приводит при больших сжатиях к «размягчению» продольных мод в точках L и X для всего ряда кристаллов Ne–Xe и поперечных мод в направлениях Σ и Λ для Xe, что говорит о неустойчивости ГЦК-фазы.

4. Проведен количественный анализ фононных частот для сжатых кристаллов инертных газов в широком интервале давлений, который показал, что вклад деформации электронных оболочек в парном и трехчастичном

приближениях различен для разных точек главного значения и увеличивается с ростом давления. Вклад трехчастичных сил за счет перекрытия электронных оболочек соседних атомов мал на фоне парного взаимодействия даже при высоком давлении и наиболее заметен в Хе.

5. Построена динамическая матрица с учетом деформации электронных оболочек дипольного типа в парном приближении. На ее основе с помощью метода Чади-Козна рассчитаны энергия нулевых колебаний, решеточная теплоемкость, температура Дебая, среднеквадратичное смещение и параметр Линдемана для кристаллов ряда Ne–Хе в широком интервале давления и температур. Показано, что вклад деформации электронных оболочек незначителен на фоне парного взаимодействия и приводит к улучшению согласия с экспериментом.

6. Количественно изучена деформация электронных оболочек атомов квадрупольного вида. Параметры трехчастичного взаимодействия и квадрупольного взаимодействия выведены с помощью интегралов перекрытия атомных орбиталей соседних атомов, а также их производных; кроме того, они имеют один и тот же порядок.

7. Показано, что парное взаимодействие вносит основной вклад в упругие модули, независимо от величины давления. То есть, B_{11} при учете трехчастичного взаимодействия и квадрупольного взаимодействия почти не меняется, в основном поправка к парному взаимодействию в B_{12} обязана трехчастичному взаимодействию, а в B_{44} – квадрупольному взаимодействию.

8. Выявлено, что в области высоких давлений линейная зависимость модулей упругости Бирча от давления, рассчитанных на основе парного потенциала, оказывается невыполнимой при учете трехчастичного и квадрупольного взаимодействий. Это позволяет получить нулевой сдвиговый модуль B_{44} при 75 ГПа для Хе, что соответствует экспериментально наблюдаемому переходу ГЦК-ГПУ.

9. Рассчитаны модули упругости Фукса второго порядка и их производные по давлению с учетом трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек квадрупольного типа в широком интервале давлений. Расчет dB/dp находится в хорошем согласии с экспериментом для Ar-Хе (погрешность $\sim 3\%$) и несколько хуже – для Ne.

10. Рассчитана величина коэффициента упругой анизотропии A_z с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий, которая демонстрирует неустойчивость ГЦК-фазы, что экспериментально доказано.

11. Показано, что барическая зависимость отклонения от соотношения Коши рассматриваемых кристаллов инертных газов носит индивидуальный характер. Но, в случае неона, криптона и ксенона, вклады двух конкурирующих взаимодействий, а именно многочастичного и квадрупольного, компенсируются с хорошей точностью, что обеспечивает едва заметную барическую зависимость отклонения от соотношения Коши в абсолютном согласии с экспериментальными данными.

Цитируемая литература

- [1]. Криокристаллы // Под общ. ред. академиков АН УССР Б.И. Веркина, А.Ф. Прихотько – Киев: Наукова думка, 1983. – 528 с.
- [2]. Aziz R.A. The Ne-Ne interatomic potential revisited / R.A. Aziz, M.J. Slaman // Chem. Phys. – 1989. -Vol. 130. – P.187–194.
- [3]. Aziz R.A. The argon and krypton interatomic potential revisited/ R.A. Aziz, M.J. Slaman // Mol. Phys. – 1986. – Vol. 58, N. 4. – P.679-697.
- [4]. Aziz R.A. On the Xe-Xe potential energy curve and related properties/ R.A. Aziz, M.J. Slaman // Mol. Phys. – 1986. – Vol. 57, N. 4. – P.825-840.
- [5]. Loubeyre P. Three-body exchange interaction in dense helium/ P. Loubeyre // Phys. Rev. Lett. – 1987. – Vol. 58, N. 18. – P.1857-1860.
- [6]. Loubeyre P. Three-body exchange interaction in dense rare gases/ P. Loubeyre // Phys. Rev. B – 1988. – Vol. 37, N. 10. – P.5432-5439.
- [7]. Freiman Yu.A. Many-body interactions and high-pressure equations of state in rare-gas/ Yu.A. Freiman, S.M. Tretyak // Fiz. Nizk. Temp. – 2007. – Vol. 33, N. 6/7. – P.719-727.
- [8]. Pechenic E. Many-body model of rare gases at high pressures/ E. Pechenic, I. Kelson, G. Makov // Phys. Rev. B – 2008. – Vol. 78. – 134109.
- [9]. Gupta S. Seismic wave velocities of rare gas solids through elastic properties in Earth's lower mantle/ S. Gupta, S.C. Goyal. // Sci China Ser D-Earth Sci. – 2009. – Vol. 52, N. 10. – P.1599-1611.
- [10]. Hohenberg P. In homogenous electron gas/ P. Hohenberg, W. Kohn// Phys. Rev. B. – 1964. – Vol. 136, N 3. – P. 864-871.
- [11]. Максимов Е.Г. Расчеты физических свойств ионных кристаллов из первых принципов/ Е.Г. Максимов, В.И. Зиненко, Н.Г. Замков // УФН. – 2004. –Т. 174, № 11. – С.1145-1170.
- [12]. Kohn W. Self consistent equations including exchange and correlation effects/ W. Kohn, L.J. Sham // Phys. Rev. A. – 1965. – Vol. 140, N. 4. – P.1133-1137.
- [13]. Kwon J. First-principles study of solid Ar and Kr under high compression/ J. Kwon, L.A. Collins, J.D. Kress, N. Troullier // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 52, N. 21. – P.15165-15169.
- [14]. Tsuchiya T. First-principles study of systematics of high-pressure elasticity in rare gas solids Ne, Ar, Kr, and Xe/ T. Tsuchiya, K. Kawamura // J. Chem. Phys. – 2002. – Vol. 117, N. 12. – P.5859-5865.
- [15]. Caldwell W.A. Structure, bonding, and geochemistry of xenon at high pressures/ W.A. Caldwell, J.H. Nguyen, B.G. Pfommer, F. Mauri, S.G. Louie, R. Jeanloz // Science. – 1997. – Vol. 277, N. 5328. – P.930-933.
- [16]. Springborg M. Structural and electronic properties of Xe/ M. Springborg // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – Vol. 12. – P.9869-9883.
- [17]. Dewhurst J.K. Lattice dynamics of solid xenon under pressure/ J.K. Dewhurst, R. Ahuja, S. Li, B. Johansson // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 88, N. 7. – 075504.
- [18]. Kohn W. Van der Waals energies in density functional theory/ Kohn W., Meir Y., Makarov D.E. // Phys. Rev. Lett. – 1998. – Vol. 80, N/ 19. – P.4153–4156.
- [19]. Sasaki S. High-pressure Brillouin study of the elastic properties of rare-gas solid xenon at pressures up to 45 GPa / S. Sasaki, N. Wada, T. Kumi, H. Shimizu // J. Raman Spectrosc. – 2009. – V. 40 – P.121-128.

[20]. Dick B.G. Theory of the dielectric constants of alkali halide crystals/ B.G. Dick, A.W. Overhauser // Phys. Rev. – 1958. – Vol. 112. – N. 1. – P.90-103.

[21]. Толпыго К.Б. Физические свойства решетки типа каменной соли, построенной из деформируемых ионов/ К.Б. Толпыго // ЖЭТФ. – 1950. – Т. 20, № 6. – С.497-510.

[22]. Толпыго К.Б. Силы взаимодействия между ионами и уравнения колебаний ионных решеток, полученные на основе многоэлектронного рассмотрения состояний ионов и адиабатического приближения / К.Б. Толпыго // УФЖ. – 1959. – Т. 4, № 1. – С.72-92.

[23]. Толпыго К.Б. Дальнедействующие силы и уравнения динамики гомеоплярных кристаллов типа алмаза /К.Б. Толпыго // ФТТ. – 1961. – Т. 3, № 4. – С.943-956.

[24]. Толпыго К.Б. Распространение динамической теории кристаллических решеток с деформированными атомами на кристаллы элементов нулевой группы/ К.Б. Толпыго, Е.П. Троицкая // ФТТ. – 1971. – Т. 13, № 4. – С.1135–1144.

[25]. Заславская И.Г. Спектр собственных колебаний NaCl с учетом деформации ионов/ И.Г. Заславская, К.Б. Толпыго // УФЖ. – 1956. – Т. 1, № 3. – С.226-245.

[26]. Tolpygo K.B. Exchange-quadrupole forces and phonon dispersion for the simplest cubic crystals / K.B. Tolpygo // Phys. Stat. Sol. (b) –1973. – V. 56, N. 2. – P.591-601.

[27]. Болонин О.Н. Квадрупольное взаимодействие в динамике решетки кристаллов. – Автореф. дис... канд. физ.-мат. наук / О.Н. Болонин – Донецк, 1977 – 131с.

[28]. Болонин О.Н. Квадрупольная деформация атомов в динамике решетки твердых благородных газов / О.Н. Болонин, К.Б. Толпыго // ФТТ. – 1973. – Т. 15, № 6. – С.1674-1682.

[29]. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов/ И.В. Абаренков, И.М. Антонова, В.Г. Барьяхтар, В.Л. Булатов, Е.В. Зароченцев. – Киев: Наукова думка, 1991 – 450с.

[30]. Clementi F. Roothan-Hartree-Fock Atomic Wave Functions/ F. Clementi, C. Roetti // At. data nucl. data table. – 1974. – Vol. 14, N. 3-4. – P.177-478.

[31]. Белоголовский М.А. Исследование уравнений колебаний кристаллов элементов нулевой группы, учитывающих деформацию электронных оболочек/ М.А. Белоголовский, К.Б. Толпыго, Е.П. Троицкая // ФТТ. – 1971. – Т. 13, № 7. – С.2109-2116.

[32]. Горбенко Е.Е. Теория атомных свойств сжатых кристаллов инертных газов: дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.07: защищена 13.03.2008 / Е.Е. Горбенко – Донецк, 2008 – 131с.

[33]. Chadi D.J. Special Point in the Brillouin Zone / D.J. Chadi, M.L. Cohen // Phys. Rev. B. – 1973. – Vol. 8, N. 12. – P.5747-5753.

[34]. Baldereschi A. Mean-Value Point in the Brillouin Zone // Phys. Rev. B. – 1973. – Vol. 7, N 12. – P.5212-5215.

[35]. Batchelder D.N. Measurements of Lattice Constant, Thermal Expansion, and Isothermal Compressibility of Neon Single Crystals / D.N. Batchelder, D.L. Losee, R.O. Simmons // Phys. Rev. – 1967. – V. 162, N. 3. – 767.

-
- [36]. Fenichel H. Low-Temperature Specific Heats of Solid Neon and Solid Xenon / H. Fenichel, B. Serin // Phys. Rev. – 1966. – V. 142. – 490.
- [37]. Eckert J. Phonon dispersion and mode Gruneisen parameters in neon at high density / J. Eckert, W.B. Daniels, J.D. Axe // Phys. Rev. B. – 1976. – V. 14, N. 8. – P.3649-3663.
- [38]. Beaumont R.H. Thermodynamic properties of krypton. Vibrational and other properties of solid argon and krypton / R.H. Beaumont, H. Chihara, J.A. Morrison // Proc. Phys. Soc. – 1961. – V. 78, N. 506. – P.1462-1481.
- [39]. Зароченцев Е.В. Теплоемкость и тепловые колебания решетки кристаллов элементов нулевой группы / Е.В. Зароченцев, К.Б. Толпыго, Е.П. Троицкая // ФНТ. – 1979. – Т. 5, № 11. – С.1324-1332.
- [40]. Moyano G.E. Lattice dynamics for fcc rare gas solids Ne, Ar, and Kr from *ab initio* potentials / G.E. Moyano, P. Schwerdtfeger, K. Rosciszewski // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 75. – 4101.
- [41]. Flubacher P. Constant-volume specific heat of solid argon / P. Flubacher, A.J. Leadbetter, J.A. Morrison // Proc. Phys. Soc. – 1961. – V. 78. – 1449.
- [42]. Crawford R.K. The Vacancies-in-Solid Model Applied to Solid Argon / R.K. Crawford, W.E. Lewis, W.B. Daniels // J. Phys. C – 1976. – V. 9, N. 8. – 1381.
- [43]. Физика фононов / Дж. Рейсланд. – Москва: Мир, 1975 – 368с.
- [44]. Shimizu H. High-pressure elastic properties of liquid and solid neon to 7 GPa / H. Shimizu, H. Imaeda, T. Kume, S. Sasaki // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 71. – 014108.
- [45]. Shimizu H. High-pressure elastic properties of liquid and solid krypton to 8 GPa / H. Shimizu, N. Saitoh, S. Sasaki // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 57, N. 1. – P.230-233.
- [46]. Зароченцев Е.В. Уравнение состояния кристаллов инертных газов вблизи металлизации / Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая // ФТТ. – 2001. – Т. 43, № 7. – С.1292-1298.
- [47]. Anderson M.S. Experimental equation of state for the rare-gas solids / M.S. Anderson, C.A. Swenson // J. Phys. Chem. Sol. – 1975. – V. 36, N. 1. – P.145-161.
- [48]. Jephcoat A.P. Pressure-induced structural phase transitions in solid xenon/ A.P. Jephcoat, H.K. Mao, L.W. Finger, D.F. Lox, R.J. Hemley, C.S. Zha // Phys. Rev. Lett. – 1987. – V. 59. – P.2670-2673.
- [49]. Goettel K.F. Optical evidence for the metallization of xenon at 132(5) GPa/ K.F. Goettel, J.H. Eggert, J.F. Silvera, W.C. Moss // Phys. Rev. Lett. – 1989. – V. 62. – P.665-668.
- [50]. Барьяхтар В.Г. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Атомные свойства металлов / В.Г. Барьяхтар, Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая – Киев: Наукова думка, 1990 – 373с.
- [51]. Lehri S. Third-Order Elastic Constants and the Pressure Derivatives of the Second-Order Elastic Constants of Rare Gas Solids / S. Lehri, M.P. Verma // Phys. Status Solidi (b). – 1980. – V. 98. – 789.
- [52]. Swenson C.A. In: Rare Gas Solids / Eds M.L. Klein, J.A. Venables. – V. 11. – N.Y.: Academic Press, 1977. –863 p..
- [53]. Grimsditch M. Brillouin scattering and three-body forces in argon at high pressure/ M. Grimsditch, P. Loubeyre, A. Polian // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 33, N. 10. – P.7192-7200.

[54]. Shimizu H. High-Pressure Elastic Properties of Solid Argon to 70 GPa/ H. Shimizu, H. Tashiro, T. Kume, S. Sasaki // Phys. Rev. Lett. – 2001. – Vol. 86, N. 20. – P.4568–4571.

[55]. Iitaka T. First principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures/ T. Iitaka, T. Ebisuzaki // Phys. Rev. B. – 2001. – Vol. 65. – 012103.

Основное содержание диссертационной работы изложено в следующих публикациях:

Статьи в журналах, индексируемых в БД “WoS” и “Scopus”

A1. Троицкая, Е. П. Неадиабатические эффекты в динамике решетки сжатых кристаллов инертных газов / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47. – № 9. – С. 1683-1688.

A2. Троицкая, Е. П. Элементарные колебания в кристаллах инертных газов: фононные частоты сжатых кристаллов ряда Ar-Xe / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2006. – Т. 48. – № 4. – С. 695-699.

A3. Interatomic potential and elastic constants of rare-gas crystals under pressure / E. V. Zarochentsev, V. N. Varyukhin, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, **E. E. Horbenko** // Physica Status Solidi (b). – 2006. – Vol. 243. – No 12. – P. 2672-2686. – DOI: 10.1002/pssb.200541378 Scopus Q3, WoS Q3
<https://doi.org/10.1002/pssb.200541378>.

A4. **Horbenko, E. E.** Lattice dynamics of cryocrystals at high pressure / E. E. Horbenko, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko // Физика низких температур. – 2007. – Т. 33. – No 6/7. – С. 752-757.

A5. Троицкая, Е. П. Фононы и электрон-фононное взаимодействие в кристаллах инертных газов при высоких давлениях / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49. – № 11. – С. 2055-2062.

A6. Динамика решетки тяжелых кристаллов инертных газов под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50. – № 4. – С. 696-702.

A7. Троицкая, Е. П. Динамика решетки легких кристаллов инертных газов под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51. – № 10. – С. 1999-2005.

A8. Ab initio расчеты фононных частот и связанных с ними свойств кристаллического Ne под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика низких температур. – 2009. – Т. 35. – № 10. – С. 1041-1050.

A9. Ab initio расчеты трехчастичного взаимодействия в криокристаллах под давлением / **Е. Е. Горбенко**, И. В. Жихарев, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, Н. В. Кузовой // Физика низких температур. – 2011. – Т. 37. – № 5. – С. 558-563.

A10. Ab initio теория многочастичного взаимодействия и соотношения Коши в сжатых кристаллах инертных газов / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53. – № 8. – С. 1555-1563.

A11. Квадрупольная деформация электронных оболочек в динамике решетки сжатых кристаллов инертных газов / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е.А. Пилипенко // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – № 6. – С. 1172-1179.

A12. Упругие свойства сжатого кристаллического Ne в модели деформируемых атомов / Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко, И.В. Жихарев, **Е.Е. Горбенко**, Е.А. Пилипенко // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55. – № 2. – С. 347-353.

A13. Elastic properties of compressed cryocrystals in a deformed atom model / **Ie. Ie. Gorbenko**, I. V. Zhikharev, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, E. A. Pilipenko // Физика низких температур. – 2013. – Vol. 39. – N 6. – P. 716-721.

A14. Упругие свойства тяжелых кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, Е. А. Пилипенко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55. – № 11. – С. 2218-2226.

A15. Ab initio theory of the many-body interaction and elastic properties of rare-gas crystals under pressure / V. N. Varyukhin, E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko, **Ie. Ie. Gorbenko**, E. A. Pilipenko // Physica Status Solidi (b). – 2014. – V. 251. – No 4. – P. 774-787. – DOI: 10.1002/pssb.201350065 Scopus **Q2**, WoS **Q3** <https://doi.org/10.1002/pssb.201350065>.

A16. Ab initio теория многочастичного взаимодействия и фононные частоты кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Е. А. Пилипенко // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57. – № 1. – С. 114-123.

A17. Adiabatic potential and elastic properties of compressed rare-gas crystals in the model of deformable atoms / V. N. Varyukhin, E. P. Troitskaya, **Ie. Ie. Gorbenko**, E. A. Pilipenko, V. V. Chabanenko // Physica Status Solidi (b). – 2015. – V.252. – No 4. – P. 709-720. – DOI: 10.1002/pssb.201451020 Scopus **Q2**, WoS **Q3** <https://doi.org/10.1002/pssb.201451020>.

A18. Троицкая, Е. П. Многочастичное взаимодействие и деформация электронных оболочек атомов в динамике решетки сжатых атомарных криокристаллов / Е. П. Троицкая, **Е. Е. Горбенко**, Е. А. Пилипенко // Физика низких температур. – 2016. – Т. 42. – № 5. – С. 526-538.

A19. **Горбенко, Е.Е.** Упругие свойства сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов / Е. Е. Горбенко, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – № 1. – С. 126-133.

A20. Троицкая, Е. П. Абсолютная неустойчивость ГЦК-решетки кристаллов инертных газов под давлением / Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61. – № 1. – С. 154-162. – DOI: 10.21883/FTT.2019.01.46906.118 <http://dx.doi.org/10.21883/FTT.2019.01.46906.118>.

Статьи, индексируемые в БД “РИНЦ”

A21. Троицкая, Е. П. Элементарные колебания в кристаллах инертных газов. 2.Фононные частоты сжатого кристаллического неона / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2004. – Т. 14. – № 3. – С. 7-24.

A22. Троицкая, Е. П. Фононная дисперсия сжатых кристаллов инертных газов в ГЦК-фазе / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2005. – Т. 15. – № 2. – С. 7-11.

A23. Троицкая, Е.П. Элементарные колебания в кристаллах инертных газов. 3.Фононные частоты сжатых кристаллов / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2005. – Т. 15. – № 3. – С. 7-22.

A24. Троицкая, Е. П. Динамическая матрица и фононы в кристаллах инертных газов при высоких давлениях / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2006. – Т. 16. – № 1. – С. 25-37.

A25. **Горбенко, Е. Е.** Критерии образования новых состояний в условиях высокого давления. Кристаллы инертных газов / Е. Е. Горбенко, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко // Физика и техника высоких давлений. – 2007. – Т. 17. – № 2. – С. 26-31.

A26. Энергия нулевых колебаний в сжатых кристаллах ряда Ne-He / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика и техника высоких давлений. – 2007. – Т. 17. – № 3. – С. 14-26.

A27. Теплоемкость ГЦК-Хе под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика и техника высоких давлений. – 2007. – Т. 17. – № 4. – С. 17-27.

A28. Теплоемкость ГЦК-Kr под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика и техника высоких давлений. – 2008. – Т. 18. – № 2. – С. 32-41.

A29. Теплоемкость ГЦК-Ar под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой, Э. Я. Штаерман. // Физика и техника высоких давлений. – 2009. – Т. 19. – № 3. – С. 69-78.

A30. Троицкая, Е. П. Теплоемкость сжатого кристаллического неона / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2009. – Т. 19. – № 4. – С. 7-17.

A31. *Ab initio* теория многочастичного взаимодействия в короткодействующем потенциале отталкивания / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е. А. Пилипенко // Физика и техника высоких давлений. – 2010. – Т. 20. – № 2. – С. 15-30.

A32. Отклонения от соотношения Коши в легких кристаллах инертных газов при больших давлениях / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика и техника высоких давлений. – 2010. – Т. 20. – № 3. – С. 19-31.

A33. *Ab initio* расчеты квантовых эффектов в кристаллах инертных газов под давлением / И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко,

Е. А. Пилипенко // Физика и техника высоких давлений. – 2011. – Т. 21. – № 2. – С. 19-27.

А34. Квадрупольное взаимодействие в динамике решетки сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов. 1.Общая теория / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е. А. Пилипенко // Физика и техника высоких давлений. – 2011. – Т. 21. – № 4. – С. 7-28.

А35. Квадрупольное взаимодействие в динамике решетки сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов. 2.Упругие свойства и соотношение Коши в сжатом неоне / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е. А. Пилипенко // Физика и техника высоких давлений. – 2012. – Т. 22. – № 2. – С. 37-53.

А36. Упругие свойства легких кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, Е. А. Пилипенко // Физика и техника высоких давлений. – 2013. – Т. 23. – № 2. – С. 5-16.

А37. Квадрупольное взаимодействие в динамике решетки сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов. 3.Упругие свойства и соотношение Коши для Kr и Xe / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, Е. А. Пилипенко, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2013. – Т. 23. – № 4. – С. 20-34.

А38. Упругие свойства и соотношение Коши легких кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, И. А. Вербенко, А. А. Павелко // Вестник ЛНУ им. В. Даля. – 2017. – № 2(4), Ч. 1. – С. 31-36.

А39. Пилипенко, Е.А. Упругие модули Фукса второго порядка и их производные по давлению для сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов / Е. А. Пилипенко, Е. П. Троицкая, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2017. – Т. 27. – № 2. – С. 37-50.

А40. Пилипенко, Е. А. Ab initio теория фазовых переходов в сжатых кристаллах ряда Ne–Xe / Е. А. Пилипенко, Е. П. Троицкая, **Е. Е. Горбенко** // Физика и техника высоких давлений. – 2018. – Т. 28. – № 1. – С. 30–45.

А41. Структурные переходы и абсолютная неустойчивость ГЦК-решетки тяжелых кристаллов инертных газов при высоких давлениях / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, А. О. Ткачева, И. А. Вербенко, А. А. Павелко. // Вестник ЛНУ им. В. Даля. – 2018. – № 5(11). – С. 48-56.

Главы в зарубежных монографиях

А42. Phase transitions in the rare-gas solids under pressure / **Ie. Ie. Gorbenko**, E. P. Troitskaya, E. A. Pilipenko, A. V. Pavlenko, Yu. I. Yurasov. // Proceedings of the 2016 International Conference on "Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications". – New York : Nova Science Publishers. – 2017. – Ch. 53. – P. 375-381.

А43. Third-order Fuchs elastic constants and the pressure derivatives of the second-order elastic constants for compressed Ne and Ar in the model of deformable atoms / **Ie. Ie. Gorbenko**, E. P. Troitskaya, E. A. Pilipenko, I. A. Verbenko, Yu. I. Yurasov // Springer Proceedings in Physics : Advanced Materials – Proceedings of the International Conference on "Physics and Mechanics of New Materials and Their

Публикации, представленные в сборниках материалов, трудах, тезисах конференций различного уровня и других изданиях

A44. **Горбенко, Є. Є.** Пружні властивості кристалів Ar та Kr під тиском / Є. Є. Горбенко, О. П. Троїцька, В. В. Чабаненко // HEUREKA-2005 : International Conference for Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics, May 24-26, 2005, Lviv, Ukraine : abstract book. – Львів, 2005. – С. 77–78.

A45. **Horbenko, E. E.** Elastic constants and Cauchy relations for strained rare-gas crystals / E. E. Horbenko, E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko // Proceedings of the Fifth International Young Scientists' Conference on Applied Physics, June, 20-22, 2005, Kyiv, Ukraine. – Kyiv, 2005. – P. 127-129.

A46. **Horbenko, E.E.** Elastic properties of compressed rare-gas crystals / E. E. Horbenko, E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko // Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications : Annual Conference in Ukraine, 28-30 August 2005, Lviv, Ukraine : book of abstracts. – Lviv, 2005. – P. 137

A47. **Горбенко, Е. Е.** Фундаментальная щель при переходе изолятор-металл под давлением / Е. Е. Горбенко, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко // Надтверді, композиційні матеріали та покриття: отримання, властивості, застосування : третя Всеукраїнська конференція молодих вчених та спеціалістів, 18-19 квітня 2006 року : тези доповідей. – Київ : ІНМ НАНУ, 2006. – С. 23-25.

A48. **Горбенко, Є. Є.** Розрахунок ab initio фононних частот у стисненому монокристалі аргону / Є. Є. Горбенко, О. П. Троїцька, В. В. Чабаненко // „Еврика-2006 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, Львів, 15-17 травня збірник тез. – Львів, 2006. – С. В11.

A49. **Horbenko, E. E.** Lattice dynamics of cryocrystals at high pressure / E. E. Horbenko, E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko // CC-2006 : Sixth International Conference on Cryocrystals and Quantum Crystals, 3-7 September 2006 , Kharkov, Ukraine : program and abstracts. – Kharkov, 2006. – P. 91-92.

A50. **Horbenko, E. E.** Insulator-metal transition under pressure / E. E. Horbenko, E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko // Statistical Physics 2006. Condensed Matter: Theory & Applications : International Conference in Ukraine, 12-15 September 2006 , Kharkov, Ukraine : program abstracts. – Kharkiv, 2006. – P. 72.

A51. **Горбенко, Е. Е.** Критерий образования новых состояний в условиях высокого давления. Кристаллы инертных газов / Е.Е. Горбенко, Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко // Высокие давления – 2006. Фундаментальные и прикладные аспекты : 9-я Международная конференция, 17-22 сентября 2006 г., Судак, Крым, Украина : тезисы –Донецк : Норд-Пресс, 2006. – С. 25.

A52. Динаміка ґратки кристалічного ГЦК-Хе під тиском / М. В. Кузовий, Є. Є. Горбенко, О. П. Троїцька, В.В. Чабаненко // Еврика-2007 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, Львів, 22-24 травня : тези доповідей. – Львів, 2007. – С. В28.

A53. Ab initio lattice dynamics calculations for nonmetals at high pressure / E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko, **E. E. Horbenko**, N.V. Kuzovoy, E. Ya. Shtaerman // International Conference "Functional Materials" ICFM-2007 : book of abstracts. – Partenit, Ukraine : Taylor & Francis, 2007. – P. 278.

A54. Нульові коливання стиснених кристалів інертних газів / **Є. Є. Горбенко**, О. П. Троїцька, В. В. Чабаненко, М. В. Кузовий // Еврика-2008 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, 19-21 травня 2008 року, Львів, Україна : тези доповідей. – Львів, 2008. – С. В7.

A55. First principles study of the heat capacity for compressed fcc cryocrystals / N. V. Kuzovoy, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, **Е. Е. Горбенко** // Фізика низьких температур. КМВ-ФНТ-2008 : 1-а Всеукраїнська наукова конференція молодих вчених, 20-23 травня 2008 р. : програма і тези доповідей. – Харків, 2008. – С. 87.

A56. Теплоемкость ГЦК-Ar под давлением / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Вал. В. Чабаненко, Н. В. Кузовой, Э. Я. Штаерман // Высокие давления – 2008. Фундаментальные и прикладные аспекты : 10-я Международная конференция, 16-20 сентября 2008 г., Судак, Крым, Украина : тезисы – Донецк, 2008. – С. 158.

A57. Термодинамические свойства сжатых ван-дер-ваальсовых кристаллов вблизи структурных фазовых переходов / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Вал. В. Чабаненко, Н. В. Кузовой. // Структурна релаксація у твердих тілах : матеріали міжнародна науково-практична конференція, 19-21 травня, 2009 рік, Вінниця – Вінниця : Планер, 2009. – С. 140-142.

A58. Роль трьохчасткової взаємодії у порушенні співвідношення Коші в кристалічному аргоні при високому тиску / **Є. Є. Горбенко**, О. П. Троїцька, В. В. Чабаненко, М. В. Кузовий. // Еврика-2009 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, Львів, 20-22 травня : тези доповідей. – Львів, 2009. – С. А10.

A59. Ab initio расчеты трехчастичного взаимодействия в уравнении состояния кристаллического неона / Н. В. Кузовой, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко** // Фізика низьких температур КМВ-ФНТ-2009 : 2-а Всеукраїнська наукова конференція молодих вчених, 1-5 червня 2009 р. : програма і тези доповідей. – Харків, 2009. – С. 149.

A60. Відхилення від співвідношення Коші в легких кристалах інертних газів / К. О. Пилипенко, **Є. Є. Горбенко**, О. П. Троїцька, І. В. Жихарев, В. В. Чабаненко, М. В. Кузовий // Еврика-2010 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, 19-21 травня 2010 року, Львів : тези доповідей. – Львів, 2010 – С. А33.

A61. Many-body interaction and high-pressure elastic properties of light rare-gas solids / **Іе. Іе. Горбенко**, I. V. Zhikharev, O. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, M. V. Kuzovyi, K. O. Pylypenko // Low Temperature Physics : International Conference for Young Scientists, 7-11 June 2010 : abstracts book. – Kharkiv, 2010. – P.113.

A62. Ab initio calculation of three-body interaction in cryocrystals under pressure / **Іе. Іе. Горбенко**, I. V. Zhikharev, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, N. V. Kuzovoy // 8-ая международная конференция Криокристаллы и квантовые кристаллы, СС-2010, 26-31 июля, 2010 : тезисы докладов. – Черноголовка, 2010. – P. 52.

A63. Ab initio расчеты квантовых эффектов в легких кристаллах инертных газов под давлением / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Вал. В. Чабаненко, И. В. Жихарев // Высокие давления – 2010. Фундаментальные и прикладные аспекты :

11-я Международная конференция, 26-30 сентября 2010 г., Судак, Крым, Украина : тезисы – Донецк : ДонФТИ им. А. А. Галкина, 2010. – С. 36.

A64. Відхилення від співвідношення Коші в важких кристалах інертних газів / К. О. Пилипенко, О. П. Троїцька, В. В. Чабаненко, **Є. Є. Горбенко** // Еврика-2011 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, 18-20 травня 2011 року, Львів : тези доповідей. – Львів, 2011. – С. A29.

A65. Ab initio calculation of quadrupole interaction in cryocrystals under pressure / **Іе. Іе. Горбенко**, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, I. V. Zhikharev, E. A. Pilipenko // Low Temperature Physics : International Conference for Young Scientists, 6-10 June 2011 : abstract book. – Kharkiv, 2011. – P. 111.

A66. Elastic properties of compressed neon crystal in a deformed atom model / E. A. Pilipenko, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, I. V. Zhikharev, **Іе. Іе. Горбенко** // Low Temperature Physics : International Conference for Young Scientists, 14-18 May 2012 : abstract book. – Kharkiv, 2012. – P. 134.

A67. Elastic properties of compressed cryocrystals in a deformed atom model / **Іе. Іе. Горбенко**, I. V. Zhikharev, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, E. A. Pilipenko // 9th International Conference on Cryocrystals and Quantum Crystals, CC 2012, September 2-8, 2012 : programme and abstracts. – Odessa : Optimum, 2012. – P. 97.

A68. Упругие свойства легких кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / И. В. Жихарев, **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Вал. В. Чабаненко, Е. А. Пилипенко // Высокие давления – 2012. Фундаментальные и прикладные аспекты : 12-я международная конференция, 23-27 сентября 2012 г., Судак, Крым, Украина : тезисы. – Донецк, 2012. – С. 105.

A69. **Горбенко, Є. Є.** Фононна дисперсія стисненого ГЦК-Хе / Є. Є. Горбенко, К. О. Пилипенко, Я. Ф. Зайцева // Еврика-2013 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, 15-17 травня 2013 року, Львів : тези доповідей. – Львів, 2013. – С. A9.

A70. **Горбенко, Є. Є.** Дослідження пружних властивостей стисненого Ne / Є. Є. Горбенко, К. О. Пилипенко, О. С. Ногіна // Еврика-2013 : міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, 15-17 травня 2013 року, Львів : тези доповідей. – Львів, 2013. – С. A22.

A71. Elastic properties of Xe at high pressure in the model of deformable atoms / E. A. Pilipenko, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, I. V. Zhikharev, **Іе. Іе. Горбенко**. // Low Temperature Physics : IV International Conference for Young Scientists, 3-7 June 2013 : abstracts book. – Kharkiv, 2013. – P. 86.

A72. The Cauchy relation of compressed cryocrystals in the model of deformable atoms taking into account the many-body interaction / E. A. Pilipenko, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, **Іе. Іе. Горбенко**. // Low Temperature Physics : V International Conference for Young Scientists, 2-6 June 2014 : abstracts book. – Kharkiv, 2014. – P. 107.

A73. Ab initio theory of elastic properties of rare-gas crystals under high pressure / E. P. Troitskaya, V. V. Rumyantsev, E. A. Pilipenko, **Іе. Іе. Горбенко** // Journal of Photonic Materials and Technology. – 2015. – Vol. 1. – № 3. – P. 46-61. – DOI: 10.11648/j.jmpt.20150103.11.

A74. **Горбенко, Е.Е.** Фононные частоты сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов / Е. Е. Горбенко, Е. А. Пилипенко, Е. П. Троицкая

// Актуальные проблемы и достижения в естественных и математических науках : сборник научных трудов по итогам международной научно-практической конференции (7 апреля 2015 г.). – Самара : ИЦРОН, 2015. – Вып. 2. – С. 33-37.

A75. **Горбенко, Е. Е.** Модули упругости Фукса в сжатых кристаллах инертных газов / Е. Е. Горбенко, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко // Открытые физические чтения : региональная научно-практическая конференция, Луганск, 15 мая, 2015 : тезисы докладов. – Луганск : ЛУ имени Тараса Шевченко, 2015. – С. 22.

A76. Pilipenko, E. A. Effect of the deformation of the electron shells to the formation of the elastic properties of compressed atomic cryocrystals / E. A. Pilipenko, **Ie. Ie. Gorbenko**, E. P. Troitskaya // Low Temperature Physics : VI International Conference for Young Scientists, 2-5 June 2015 : abstracts book. – Kharkiv, 2015. – P. 80.

A77. **Горбенко, Е. Е.** Упругая анизотропия Зенера в кристаллах инертных газов под давлением / Е. Е. Горбенко, Е. А. Пилипенко, Е. П. Троицкая // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов (Анализ современного состояния и перспективы развития) (LFPM-2015), г. Ростов-на-Дону-Туапсе, 2-6 сентября 2015 года : труды Четвёртого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума : в 2 томах. Т. 1. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2015. – С. 144-147.

A78. **Горбенко, Е. Е.** Модули упругости Бирча с учетом трехчастичных сил в модели деформируемых атомов / Е. Е. Горбенко, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко // Открытые физические чтения : международная научно-практическая конференция, Луганск, 20 мая, 2016 : тезисы докладов. – Луганск : Альма матер, 2016. – С. 41.

A79. Phase transitions in the rare-gas solids under pressure / **Ie. Ie. Gorbenko**, E. P. Troitskaya, E. A. Pilipenko, I. A. Verbenko, Yu. I. Yurasov // Physics and Mechanics of New Materials and their Applications (PHENMA 2016) : Abstracts & Schedule, Surabaya, Indonesia, 19-22 июля 2016 года. – Surabaya, Indonesia : Южный федеральный университет, 2016. – P. 115-116.

A80. **Горбенко, Е. Е.** Расчет упругих свойств сжатого кристаллического неона в модели деформируемых атомов / Е. Е. Горбенко, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов (анализ современного состояния и перспективы развития) (LFPM-2016), Ростов-на-Дону-Туапсе, 12-15 сентября 2016 года : труды Пятого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума : в 2 т. Т. 1. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2016. – С. 161-164.

A81. Упругие свойства и соотношение Коши тяжелых кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, О. О. Талпы, А. Е. Батищев, Ю. И. Юрасов // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Анализ современного состояния и перспективы развития) (LFPM-2017), (Ростов-на-Дону – Туапсе, 2-6 сентября 2017 г.) : труды Шестого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума : в 2 т. Т. 1. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2017. – С. 238-243.

A82. Third-order Fuchs Elastic Constants and the Pressure Derivatives of the Second-order Elastic Constants for Compressed Ne and Ar in the Model of Deformable Atoms / **Ie. Ie. Gorbenko**, E. P. Troitskaya, E. A. Pilipenko, I. A. Verbenko, Yu.

I. Yurasov // Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications (PHENMA 2017): Abstracts and Schedule of the 2017 International Conference, Jabalpur, India, 14–16 октября 2017 года. – Jabalpur, India : PDPM Indian Institute of Information Technology, 2017. – P. 68-69.

A83. Абсолютная неустойчивость ГЦК-решетки сжатых кристаллов неона и аргона под давлением / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, Ю. И. Юрасов // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов (Анализ современного состояния и перспективы развития) (LFPM-2018), г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 20-24 сентября 2018 года : труды Седьмого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума : в 2 т. Т. 1. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2018. – С. 258-263.

A84. Пилипенко, Е. А. Динамическая неустойчивость сжатого кристаллического Хе / Е. А. Пилипенко, Е. П. Троицкая, **Е. Е. Горбенко** // Донецкие чтения 2019: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности : материалы IV Международной научной конференции, Донецк, 29-31 октября 2019 года. Т. 1. Физико-математические и технические науки, ч. 2. – Донецк : Донецкий национальный университет, 2019. – С. 121-124.

A85. Structural Transitions and Dynamic Instability for Compressed Rare-Gas Crystals / **Ie. Ie. Gorbenko**, E. P. Troitskaya, E. A. Pilipenko, I. A. Verbenko, Yu. I. Yurasov. // International Conference on “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications”, 7-10 November 2019 : book of abstract. – Hanoi, Vietnam : Publishing House for Science and Technology, 2019. – P. 132-133.

A86. **Горбенко, Е. Е.** Модули упругости третьего порядка тяжелых кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов / Е. Е. Горбенко, Е. А. Пилипенко, Е. В. Глазунова // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем (анализ современного состояния и перспективы развития) (LFPM-2020) : сборник трудов Девятого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума, (Ростов-на-Дону, 28-30 декабря 2020 г.) : в двух томах. Т. 2. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2020. – С. 20-24.

A87. **Горбенко, Е. Е.** Влияние трехчастичного взаимодействия на фононные частоты кристаллического криптона в модели деформируемых атомов / Е. Е. Горбенко, Е. А. Пилипенко // Современные методы исследования и диагностики поверхности : материалы Международной научно-практической конференции, г. Грозный 19 мая 2021 г. – Грозный : Чеченский государственный университет, 2021. – С. 18-26. – DOI: 10.36684/42-2021-1-18-26.