



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ДОНЕЦКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ
ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ISSN: 2664-7362



РУССКИЙ ЦЕНТР

МАТЕРИАЛЫ

VI Международной научной конференции

**Донецкие чтения 2021:
образование, наука, инновации, культура
и вызовы современности**



Том 2

Физические и технические науки

Министерство образования и науки
Донецкой Народной Республики
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Донецкий национальный университет»
Русский Центр

VI Международная научная конференция

Материалы
конференции

Том 2

**ФИЗИЧЕСКИЕ
И ТЕХНИЧЕСКИЕ
НАУКИ**

Донецкие чтения 2021: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности

г. Донецк
26–27 октября 2021 г.

Донецк
Издательство ДонНУ
2021

ББК Б.я431 + 397я431
УДК 53+62+004(043.2)
Д672

Редакционная коллегия:

С.В. Беспалова (главный редактор), М.В. Фоменко (отв. секретарь),
В.А. Дубровина, В.И. Сторожев, С.А. Фоменко, И.А. Третьяков,
Г.В. Аверин, П.В. Асланов, А.В. Безус, В.В. Данилов, А.Г. Петренко

Д672 Донецкие чтения 2021: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности: Материалы VI Международной научной конференции (Донецк, 26–27 октября 2021 г.). – Том 2: *Физические и технические науки* / под общей редакцией проф. С.В. Беспаловой. – Донецк: Изд-во ДонНУ, 2021. – 306 с.

Ответственность за содержание материалов, аутентичность цитат, правильность фактов и ссылок несут авторы.

Во второй том материалов VI Международной научной конференции «Донецкие чтения 2021: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности» вошли исследования по актуальным проблемам физических и технических наук. Рассматриваются вопросы физики неравновесных процессов, стандартизации и метрологии, прикладной экологии, теоретической физики и нанотехнологий, радиофизики, инфокоммуникационных и компьютерных технологий.

Освещенные в сборнике проблемы и направления их решения будут полезны научным работникам, преподавателям, студентам, аспирантам и докторантам, проводящим исследования в области физических и технических наук.

ББК Б.я431 + 397я431
УДК 53+62+004(043.2)

© Коллектив авторов, 2021

© Донецкий национальный университет, 2021

СОДЕРЖАНИЕ

Физика неравновесных процессов

<i>Асланов П.В., Фоменко С.А., Манзенюк Е.Н.</i> Повышение эффективности гидро-струйной резки конструкционных материалов	5
<i>Беззуб А.А.</i> Разработка энергосберегающего режима нагрева шлака при внепечной обработке стали	7
<i>Бодряга В.В.</i> Задача определения рациональной высоты кристаллизатора в установке непрерывного литья алюминия.....	10
<i>Бодряга В.В., Недопекин Ф.В.</i> Определение рационального размера капли воды при подавлении выбросов азотно-водным аэрозолем	12
<i>Соколов К.И., Подрухин А.А., Чуяшенко С.В.</i> Измельчение материалов методом гидростатической обработки.....	14
<i>Финошин Н.В., Попова А.Е., Рыжков Е.Е.</i> Экспериментальное определение коэффициентов полного гидродинамического сопротивления в трубопроводе с периодически изменяющимся поперечным сечением (ТПИПС)	17

Стандартизация и метрология

<i>Полякова А.В.</i> К вопросу о необходимости формирования государственной системы стандартизации в Донецкой Народной Республике	21
<i>Пометун Е.Д., Лебедев В.Н.</i> Комбинированный стенд для лабораторных работ по метрологии	24
<i>Романчук С.М., Силенко Е.М., Силенко С.Е., Казакова В.Е.</i> Выбор электроизоляционного покрытия электромагнитного преобразователя скорости потока жидкости.....	26
<i>Славко А.А., Асланов П.В., Бондаревский-Колотий В.А.</i> Совершенствование протокола контроля эксплуатационных параметров рентгенодиагностических аппаратов	28
<i>Стаценко А.С., Шурай П.Е., Шурай С.П.</i> Аудит поставщиков как эффективный инструмент управления качеством	31
<i>Ходыревская С.В., Раевская М.П.</i> Совершенствование процесса производства медицинского стекла посредством стандартизации	35

Прикладная экология

<i>Александрова А.А., Сердюк А.И.</i> Проблемы использования возобновляемых источников энергии.....	38
<i>Барбашова М.В., Карпинец А.П.</i> Физические принципы, физико-химические процессы образования нефти, природного газа и возобновляемости их запасов	41
<i>Белецкий Я.О., Сердюк А.И.</i> Способы переработки химических источников тока...	44
<i>Васильева М.А.</i> Разработка мероприятий по уменьшению выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух в периоды неблагоприятных метеорологических условий для предприятий I, II, III категории	46

<i>Григорьев Е.С., Полянский А.А.</i> Пьезоэлектрики в альтернативных источниках энергии	49
<i>Громенко В.О., Рублева Л.И., Алёхов Ю.А., Светлаков О.Ю., Журавлев С.В.</i> Разработка и особенности технологического процесса утилизации цинковой изгари для синтеза жидких хелатных микроудобрений.....	51
<i>Калининихин О.Н., Вишнякова А.Н.</i> Совершенствование системы транспортировки твердых коммунальных отходов	54
<i>Кандаева И.В., Тарасенко В.А.</i> Пылеподавление на угольных шахтах как необходимый фактор сохранения жизни и здоровья работников	57
<i>Кликань Р.В., Шатохин П.А.</i> Обращение с отходами – время инноваций.....	61
<i>Прилико С.Ю., Кудрявцев Ю.А., Брюханова И.И., Головань Г.Н., Глазунова В.А., Бурховецкий В.В.</i> Керамика с пористой структурой как фильтрующий материал для очистки шахтных вод.....	64
<i>Тишанинов И.А., Баулин Н.К.</i> Анализ состояния переработки и рециклинга техники в Российской Федерации и за рубежом.....	67
<i>Шестакин Н.С.</i> системный подход к формированию цифровой платформы спутникового мониторинга экологической, климатической, техносферной и продовольственной безопасности Донбасса	69
<i>Щетина Н.Д., Рублева Л.И., Громенко В.О., Капитанчук Е.Ю., Удодов И.А.</i> Оценка экологической безопасности применения продуктов комплексной переработки цинковой изгари.....	72

Теоретическая физика и нанотехнологии

<i>Беличко Д.Р., Константинова Т.Е., Малецкий А.В., Волкова Г.К.</i> Образование гибридных компонент в структуре керамики на основе YSZ	75
<i>Галинский М.К., Румянцев В.В., Федоров С.А.</i> Математическое моделирование структуры электромагнитного пространственно-временного волнового пакета методом обратной задачи.....	78
<i>Глухова Ж.Л., Щеголева Т.А.</i> Обобщенные уравнения диффузионного переноса водорода в металлах	81
<i>Грибанов И.Ф., Нырков Н.Ю., Андрейченко Е.П., Ковалев О.Е.</i> Магнитное поведение магнитокалорического сплава $MnNi_{0.85}Co_{0.15}Ge_{1.05}$ под давлением	83
<i>Изотов А.И., Кильман Г.В., Сироткин В.В., Шалаев Р.В.</i> Анизотропия проводимости в графитоподобных пленках.....	86
<i>Лихтенштейн И.Я., Шемченко Е.И., Петренко А.Г.</i> Структура и механизм роста многослойных углеродных нанотрубок в пленках нитрида углерода, легированных оксидом европия	88
<i>Метлов Л.С., Гордей М.М.</i> Неравновесная эволюционная термодинамика двухкомпонентных сплавов при интенсивной пластической деформации	91
<i>Михайлов В.И., Тарасенко Т.Н., Кравченко З.Ф., Ковалев О.Е.</i> Концентрационные зависимости намагниченности композиционных мультиферроиков $(1-x)BiFeO_3-xR MnO_3$ ($R = Sc, Y$)	94
<i>Николаенко Ю.М., Эфрос Н.Б.</i> Оптимизация процедуры термообработки $La_{0.8}Sr_{0.2}MnO_{3-\delta}$ пленок разной толщины на подложках $NdGaO_3$	97

<i>Паладян Ю.А., Федоров С.А., Румянцев В.В.</i> Распространение света в неидеальном 1d фотонном кристалле.....	99
<i>Петренко А.Г., Сухорукова Т.Ф.</i> Влияние внешних полей на физические свойства перовскитов.....	102
<i>Пилипенко Е.А., Горбенко Е.Е.</i> Температура Дебая сжатого ГЦК-Ne в модели деформируемых атомов.....	105
<i>Пойманов В.Д.</i> Генерация обменных спиновых волн магнитным слоем при наличии неоднородного релятивистского обмена Дзялошинского.....	108
<i>Полищук В.С., Пересадаченко А.Н., Алехов Ю.А., Волошанович И.Н., Мищенко А.Г.</i> Анизотропные магнитно-абразивные порошки.....	111
<i>Рыбалка А.Е., Федоров С.А., Румянцев В.В.</i> Влияние однородной деформации на скорость распространения поляритонных возбуждений в неидеальной цепочке микропор.....	114
<i>Самойленко З.А., Ивахненко Н.Н., Пушенко Е.А.</i> Перестройка атомной структуры $Bi_{1-x}Y_xFeO_3$ от изменения концентрационного состава.....	117
<i>Сирюк Ю.А., Безус А.В., Бондарь Е.Д., Кононенко В.В.</i> Фазовые переходы в доменной структуре магнитоодноосной пленки феррита-граната.....	120
<i>Сухорукова О.С., Тарасенко А.С.</i> Эластодипольный механизм формирования динамических эффектов в акустически сплошных магнитных структурах.....	122
<i>Тарасов Д.П., Толкачев Т.А.</i> Магнитные свойства нанокompозитов системы $CO_x(PZT)_{100-x}$	125
<i>Токий Н.В., Токий В.В.</i> Изменения энергии от положения анионной вакансии в (100) пластинах анатаза разной толщины.....	127
<i>Токий Н.В., Токий В.В.</i> Энергия расширенной (100) пластины анатаза с анионной вакансией.....	130
<i>Хачатурова Т.А., Бутько В.Г., Гусев А.А.</i> Запрещённая зона тетрагональной модификации диоксида кремния.....	133
<i>Хачатурова Т.А., Бутько В.Г., Гусев А.А.</i> Запрещённая зона тригональной и кубической модификаций диоксида кремния.....	136
<i>Христов А.В., Червинский Д.А., Шелест В.В.</i> Связь термодинамической устойчивости фазового состояния конденсированной среды с акустикой.....	138
<i>Червинский Д.А., Шелест В.В.</i> Особенности применения внешних дифференциальных форм в термодинамике.....	141
<i>Эфрос Н.Б., Филиппов А.Э., Николаенко Ю.М.</i> Влияние механически напряженного состояния тонких пленок на диффузионный транспорт кислорода.....	145
<i>Якименко М.Н., Недёркин В.В., Зедоми Т.Э.</i> Использование наноразмерных частиц на основе фтора.....	148

Радиофизика и инфокоммуникационные технологии

<i>Бабичева М.В., Белик Т.В.</i> Атаки на алгоритм Диффи-Хелмана.....	151
<i>Данилов В.В., Тимченко В.И.</i> Автоматизированные системы научных исследований параметров устройств на поверхностных акустических волнах.....	154
<i>Долбеценкова Н.В., Яновский А.В.</i> Передача информации при помощи акустического канала.....	157

<i>Жинкина А.С., Джанджгава К.Г., Третьяков И.А.</i> Уязвимости радиочастотной идентификации в системах безопасности.....	160
<i>Кожеекина Е.Н., Гайван Б.В.</i> Работа облачных технологий на тестируемом WEB сервере.....	163
<i>Кожеекина Е.Н., Мышкин А.Е.</i> Распознавание речи с помощью нейронных сетей ..	165
<i>Костенков В.С., Данилов В.В., Тимошенко Н.А.</i> Особенности реализации автоматизированной информационной системы по проверке подлинности документов.....	166
<i>Куриный Ф.А.</i> Анализ и исследования известных генераторов псевдослучайных последовательностей для формирования ключей авторизации доступа беспроводных телекоммуникационных систем и сетей.....	169
<i>Малашенко В.В., Гладкая А.Д., Малашенко Т.И.</i> Особенности скоростной зависимости динамического предела текучести состаренных сплавов в условиях лазерного облучения.....	173
<i>Рушечников Я.И.</i> Алгоритм интеллектуального определения типа модуляции сигнала, принимаемого SDR системой	176
<i>Тимченко В.И., Сорока В.А., Подлесный В.Ю.</i> Квантовая эффективность фототока в алмазных поликристаллических пленках	178
<i>Третьяков И.А.</i> Анализ проблем применения скрытых марковских моделей и методов их решения.....	181
<i>Третьяков И.А.</i> Перспективные материалы и технологические особенности разработки устройств телекоммуникаций на основе эхо-эффекта	183
<i>Трофимов В.В., Кутепов Д.В., Решетняк Т.А.</i> Применимость различных типов волн для обнаружения геологических нарушений	186
<i>Худяков И.И., Терещенко Ф.Н., Подлесный В.Ю.</i> Детектор для регистрации слабых оптических излучений	189
<i>Шелехова О.Г.</i> Коэффициент мощности асинхронного двигателя при отклонении питающего напряжения.....	192
<i>Яновский А.В., Рушечников Я.И., Карпушин С.А.</i> Ультразвуковое подавление закладных устройств.....	195
<i>Яновский А.В., Джанджгава К.Г., Худяков И.И.</i> Генератор виброакустической помехи	198

Компьютерные технологии

<i>Аверин Г.В.</i> Построение шкал системного времени в темпорологии.....	201
<i>Аверин Г.В., Звягинцева А.В.</i> Критерии сложности систем на основе индикативных событий	204
<i>Алябьев Б.В., Шарий Т.В.</i> Программный комплекс интеллектуального анализа мирового рынка фриланса в режиме реального времени.....	207
<i>Анастас К.В.</i> Организация внеаудиторной самостоятельной работы студентов с помощью современных компьютерных технологий	209
<i>Бодряга В.Е., Толстых В.К., Бондарец Д.В.</i> Интерполяция экспериментальных измерений температуры по поверхности охлаждаемого слитка.....	212
<i>Бондаренко В.И.</i> Рекомендация новостных статей методами машинного обучения	215
<i>Дёмин М.В., Берестовенко А.А., Козлов И.В.</i> О рациональном расчёте и проекти-	218

ровании бытовой холодильной техники с использованием компьютерных технологий.....	
<i>Ермоленко Т.В., Конончук Э.В.</i> Разведочный анализ данных о транспортных происшествиях.....	221
<i>Ермоленко Т.В., Ролик Д.В.</i> Выбор информативного вейвлет-базиса для исследования аудиозаписей сердцебиения.....	224
<i>Ермоленко Т.В., Савенков И.Н., Хвиль А.Д.</i> Выявление аномальных фаций человеческой крови с использованием машинного обучения	227
<i>Заблоцкая Т.Ю.</i> Алгоритм сегментации низкоконтрастных изображений биологической нейросетью	230
<i>Звягинцева А.В.</i> Теория событийной оценки в системном анализе	233
<i>Ключенко Е.Г., Нестругина Е.С.</i> Повышение качества диагностики заболеваний детей с помощью экспертной системы врача педиатра.....	236
<i>Ковалев И.Ю., Бондаренко В.И.</i> Подходы к построению рекомендательных систем для интернет-магазинов	238
<i>Котенко В.Н., Гладкова К.Н.</i> Автоматизированная система генерации семестровых списков учебных дисциплин бакалавриата на основе учебного плана направления подготовки	240
<i>Котенко В.Н., Елисеев В.О.</i> Инновационный метод хранения данных в играх в жанре Role-Playing Game	243
<i>Котенко В.Н., Ермоленко Е.С.</i> Проектирование и реализация системы планирования задач и целей	246
<i>Котенко Ю.В., Горбатенкова А.И.</i> Разработка REST API для организации работы полиграфической компании	249
<i>Котенко Ю.В., Криворучко К.А.</i> Автоматизированная система учета и анализа информации клуба знакомств	252
<i>Котенко Ю.В., Митяева В.В.</i> Разработка системы управления модельным агентством города Донецка посредством специализированного telegram-бота.....	255
<i>Кузнецов Д.Н., Карповский А.Ю.</i> Флуориметр для системы автоматического управления микроклиматом теплиц	258
<i>Лакиза А.С., Ломонос Г.Т.</i> Система нагрузочного тестирования и мониторинга состояния серверов доступа провайдера.....	261
<i>Ломонос Г.Т., Зайка Д.Д.</i> Система индивидуальной кислородной поддержки	263
<i>Мартыненко А.М., Богдан Я.А.</i> Исследование характеристик современных поколений видеокарт.....	266
<i>Мартыненко А.М., Васильев С.В.</i> Об оптимизации поиска наилучшего хода в компьютерной шахматной игре	268
<i>Маслов Н.С., Мартыненко А.М.</i> О разработке 2D игры в жанре roguelike с упрощенными механиками.....	271
<i>Медникова Е.В.</i> Чат-боты как элемент цифровизации банковского сектора.....	274
<i>Михнюк Е.В., Савенков И.Н., Нестругина Е.С.</i> Анализ рентгеновских снимков лёгких человека методом машинного обучения с целью постановки предварительного диагноза	276
<i>Мищенко А.А., Семилетов И.М., Базарский О.В.</i> Повышение качества изобра-	279

жений, полученных при низких уровнях освещённости сцены	
<i>Панюшкин Н.Н., Бирюкова И.П.</i> Использование макромодели для определения локальной дозовой нагрузки сплошной защиты в форме прямоугольного параллелепипеда	282
<i>Пиеничный К.А., Толстых В.К.</i> Моделирование нестационарных противоточных течений с фазовыми переходами	285
<i>Стародубцева В.А.</i> Ожидаемые компьютерные технологии	288
<i>Сушко Т.И., Караев Р.Ш., Болдырева Я.А.</i> Автоматизированное проектирование литой детали на основе твердотельного моделирования	290
<i>Фурсов Д.В., Бондаренко В.И.</i> Исследование методов прохождения тестовых заданий с распознаванием результатов тестирования	293
<i>Шарий Т.В., Шестаков Б.И.</i> Автоматическая генерация новостных статей на основе разнородных данных	295
<i>Шрамко В.В., Нестругина Е.С.</i> Мобильное приложение для оценки тяжести и прогнозирования исходов травматического шока	297

ТЕМПЕРАТУРА ДЕБАЯ СЖАТОГО ГЦК-НЕ В МОДЕЛИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ АТОМОВ

Пилипенко Е.А.¹, канд. физ.-мат. наук,
Горбенко Е.Е.², канд. физ.-мат. наук, доц.

¹ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, ДНР
²ГОУ ВО «Луганский государственный педагогический университет», г. Луганск, ЛНР
pilipenko.katerina@mail.ru

Не относится к легким кристаллам инертных газов (КИГ), которые образуют группу «Low-Z materials» (LZM) – веществ содержащих элементы с малым атомным номером (low-atomic number Z) наряду с гелием, водородом, их твердыми растворами (Ar-He, H₂-Ne и др.). Эта группа выделена исследователями, занимающимися высоким давлением, так как LZM обладают высокой сжимаемостью, что приводит к большому изменению постоянной решетки под давлением. Структурная простота делает эти кристаллы незаменимыми объектами при тестировании теории и изучении квантовых эффектов, которые в LZM играют существенную роль [1].

В работе [2] на основе неэмпирической версии квантово-механической модели деформируемых и поляризуемых атомов (модель Толпыго см. [3] и ссылки там) построена динамическая матрица с учетом обоих видов трехчастичных взаимодействий как за счет перекрытия электронных оболочек, так и за счет их деформации. Это позволило рассчитать для кристаллического Ne фононные частоты в нужных точках зоны Бриллюэна и, используя метод Чади-Коэна, энергию нулевых колебаний в широком интервале давлений.

Цель настоящей работы – исследовать влияние трехчастичного взаимодействия в короткодействующем потенциале отталкивания и деформации электронных оболочек атомов в парном и трехчастичном приближениях на температуру Дебая сжатого кристаллического Ne в широком интервале давлений и температур.

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

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

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

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

где R – универсальная газовая постоянная, k_B – постоянная Больцмана.

Удельная теплоемкость C_V мала при низких температурах $T \ll \theta_D$ (θ_D – температура Дебая при $T=0$) и пропорциональна T^3 . Поэтому для сравнений теории с экспериментом удобно рассчитывать величину

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

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

Температурная зависимость температуры Дебая $\theta(T)$ Ne при разных давлениях, которая рассчитывалась по формуле (3), представлена на рис. 1 (а). Сопоставление расчетных значений температуры Дебая $\theta(T)$ при нулевом давлении с экспериментальными данными [4] показывает правильность общего хода этой величины в достаточно широком температурном интервале 0-20 К (рис. 1 а, б). Это свидетельствует о том, что теория правильно передает значения $\omega_{лк}$ на начальном участке кривых, в первую очередь для поперечных (низких) частот.

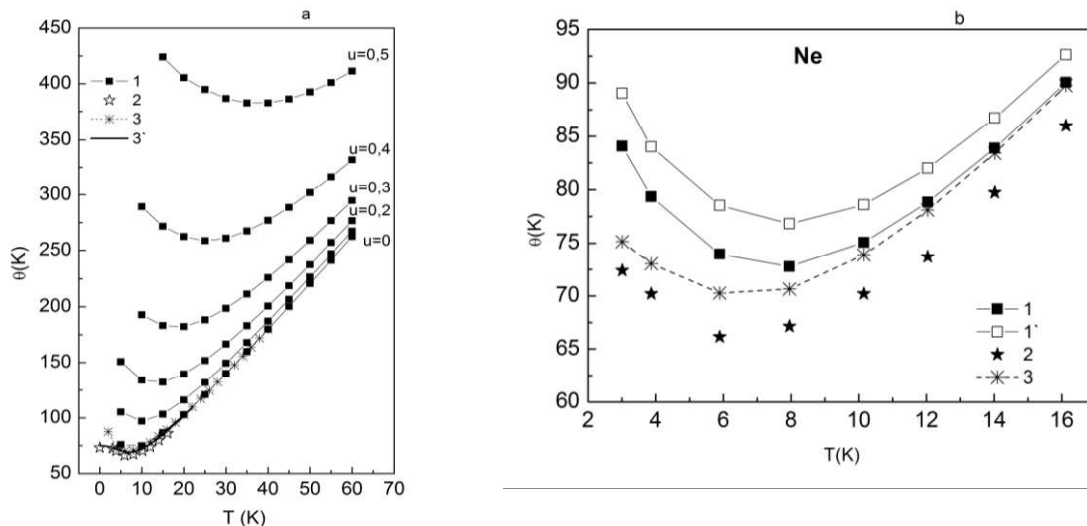


Рис. 1. Температурная зависимость $\theta(T)$ кристаллического Ne: а – при разных давлениях, б – при $p = 0$. 1 – наш расчет в модели MT_2 , 1' – расчет в модели $M3a$ [5]. 2 – эксперимент [4]. 3, 3' – расчеты в модели $M1$ по 10 [Ошибка! Залка не определена.] и 408 [6] точкам в схеме Чади-Козна, соответственно.

Однако относительная погрешность наших расчетов $\theta(T)$ [7] в моделях MT_2 (учитывает трехчастичные силы за счет перекрытия электронных оболочек и деформацию электронных оболочек атомов дипольного типа в парном и трехчастичном приближениях), $M3a$ (учет деформации электронных оболочек атома в парном приближении) и $M3$ [5] (парное взаимодействие в короткодействующем потенциале отталкивания без учета деформации электронных оболочек атома) по сравнению с экспериментом достаточно велика при низких температурах $T \leq 5$ К. Учет трехчастичных сил за счет перекрытия электронных оболочек и деформации электронных оболочек атомов дипольного типа в парном и трехчастичном приближениях (MT_2) улучшает согласие с экспериментом и

дает наименьшую погрешность (среднее значение $\gamma_{MT_2} = 9.15\%$), приближая кривую температуры Дебая к экспериментальным точкам (рис. 1b). Средние значения погрешностей моделей М3а и М3 14.43 % и 14.48 % соответственно.

Большая погрешность рассчитанных нами значений $\theta(T)$ для Ne по сравнению с экспериментом при температуре $T \leq 5\text{K}$ объясняется недостаточным числом точек Чади-Коэна (см., например, кривые 3, 3' на рис. 1а) [6]. При температуре $T \geq 10\text{K}$ – это погрешности, связанные с приближениями моделей MT_2 , М3а и М3. Кроме того, необходимо принимать во внимание, что в неоне квантовые эффекты сравнительно велики, и модель Дебая (3), хорошо описывающая свойства в классических кристаллах, недостаточна.

Количественный анализ показал, что относительная погрешность полученных результатов с экспериментальными данными уменьшается с увеличением температуры. При этом сравнение средних значений погрешностей расчетных моделей и эксперимента выявило, что вклад деформации в парном приближении уменьшает погрешность на 0,05 %, а вклад трехчастичных сил, как за счет перекрытия, так и связанных с деформацией – на 5.3 %.

Таким образом, полученные нами результаты расчета температуры Дебая для ГЦК-Ne с учетом трехчастичных сил и деформации электронных оболочек атомов дипольного типа в парном и трехчастичном приближении хорошо согласуются с экспериментом и очень близки к результатам расчета в классической модели Толпыго.

Список литературы

1. Hemley R. J. New phenomena in Low-Z materials at megabar pressures / R. J. Hemley, H. K. Mao // *Jornal of Physics: Condensed Matter* – 1998. – V.10. – P. 11157- 11168.
2. Троицкая Е. П. Энергия фононов и нулевых колебаний в сжатых кристаллических инертных газах / Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, Е. Е. Горбенко // *Физика твердого тела* – 2019. – Т. 61. – С.1890-1897.
3. Троицкая Е. П. Многочастичное взаимодействие и деформация электронных оболочек атомов в динамике решетки сжатых атомарных криокисталлов / Е. П. Троицкая, Е. Е. Горбенко, Е. А. Пилипенко // *Физика низких температур*. – 2016. – Т. 42, № 5 – С. 526–537.
4. Batchelder D. N. Measurements of lattice constant, thermal expansion, and isothermal compressibility of Ne single crystals / D. N. Batchelder, D. L. Losee, R. O. Simmons // *Physical Review B*. – 1967. – V. 162, № 3. – p. 767-775.
5. Троицкая Е. П. Первопринципные 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, № 8 – С. 1041.
6. Зароченцев Е. В. Теплоемкость и тепловые колебания решетки кристаллов элементов нулевой группы / Е. В. Зароченцев, К. Б. Толпыго, Е. П. Троицкая // *Физика Низких Температур*. – 1979. – Т. 5, № 11. – С. 1325-1332.
7. Троицкая Е. П. Удельная теплоемкость и температура Дебая сжатого кристаллического неона в модели деформируемых атомов / Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, Е. Е. Горбенко // *Физика твердого тела* – 2020. – Т. 62. – С. 2129-2113.