

**Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации**  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«ЧЕЧЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
им. Х.М. БЕРБЕКОВА»  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ И МАТЕМАТИКИ**

Государственное казенное научное учреждение  
**«АКАДЕМИЯ НАУК ЧЕЧЕНСКОЙ РЕСПУБЛИКИ»**



**«СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ДИАГНОСТИКИ  
ПОВЕРХНОСТИ»**

*Материалы Международной научно-практической конференции*

*г. Грозный 19 мая 2021 г.*

**Грозный – 2021 г.**

**УДК 538.9**  
**ББК 94+22.3**

**Ответственный редактор:**

**Кутуев Р.А.**, к.ф.-м.н., доцент, проректор по общим вопросам ФГБОУ ВО «Чеченского государственного университета»

**Редакционная коллегия:**

Дадашев Р. Х., д.ф.-м.н.,  
Алчагиров Б. Б., д.ф.-м.н.,  
Горбенко Е. Е., д.ф.-м.н.,  
Умхаева З. С., д.ф.-м.н.,  
Хоконов М. Х., д.ф.-м.н.,  
Мальшевский В. С., д.ф.-м.н.,  
Хаджимурадов М. А., д.ф.-м.н.,

Элимханов Дж. З., к.ф.-м.н.,  
Хасанов А. И., к.ф.-м.н.,  
Хасбулатов С. В., к.ф.-м.н.,  
Алихаджиев С. Х., к.ф.-м.н.,  
Алиев И. М., к.ф.-м.н.,

Современные методы исследования и диагностики поверхности. Материалы Международной научно-практической конференции (Грозный, 19 мая 2021 г.). – Грозный: издательство ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет». 2021. – 138 с.

*В настоящем сборнике представлены материалы международной научно-практической конференции «Современные методы исследования и диагностики поверхности», состоявшейся 19 мая 2021 г. в г. Грозный.*

*Программа конференции включала работу секций «Физика конденсированного состояния», «Физическая электроника», «Теплофизика и теоретическая теплотехника». Статьи посвящены основным проблемам и перспективам развития информационных технологий, а также результатам научных исследований участников конференции.*

*Сборник предназначен для широкого круга читателей, интересующихся научными исследованиями и методиками, научных работников, преподавателей, аспирантов, магистрантов и студентов с целью использования в научной работе. Статьи представлены в авторской редакции. Ответственность за аутентичность и точность цитат, имен, названий и иных сведений, а также за соблюдение законов об интеллектуальной собственности несут авторы публикуемых материалов.*

**ISSN 978-5-91127-298-2**

© Авторы, 2021 г.

© Чеченский государственный университет», 2021 г.

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Умхаева З.С., Илюшин А.С., Алероева Т.А., Терешина И.С., Панкратов Н.Ю.</b> Исследование ас-восприимчивости сплавов системы Sm(Tby)Fe <sub>2</sub> в области температуры магнитного фазового перехода.....	5
<b>Алчагиров Б.Б., Хибиев А.Х., Канаметова О.Х., Дышекова Ф.Ф., Коков З.А.</b> К определению поверхностного натяжения жидких металлов методом большой лежащей капли: влияние механических колебаний на результаты измерений.....	12
<b>Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А.</b> Влияние трехчастичного взаимодействия на фононные частоты кристаллического криптона в модели деформируемых атомов.....	18
<b>Хоконов М.Х., Бекулова И.З., Ломаносов В.С.</b> Излучение ультрарелятивистских электронов и позитронов при каналировании в кристаллах и полях мощных лазеров.....	26
<b>Кара-Мурза С.В., Корчикова Н.В., Техтелев Ю.В., Жидель К.М., Павленко А.В.</b> Эллипсометрия тонких пленок ниобатов бария-стронция.....	36
<b>Павленко А.В., Зинченко С.П. Ковтун А.П., Толмачев Г.Н., Киселева Л.И., Стрюков Д.В., Матяш Я.Ю.</b> Особенности сегнетоэлектрического состояния в поликристаллических тонких пленках Ва0.5SR0.5NB2O6 на подложке (001) Si.....	43
<b>Матиев А.Х., Успажиев Р.Т.</b> Фазовые переходы в кристаллы TlGaSe <sub>2</sub> .....	48
<b>Сайпулаева Л.А., Мельникова Н.В., Тебеньков А.В., Бабушкин А.Н., Риль А.И., Маренкин С.Ф., Захвалинский В.С.</b> Отрицательное магнитосопротивление в CdAs <sub>2</sub> при высоком давлении.....	50
<b>Андрюшин К.П., Смотрakov В.Г., Андрюшина И.Н., Еремкин В.В., Резниченко Л.А.</b> Теплофизические свойства высокотемпературных и анизотропных материалов с участием РВТЮЗ.....	56
<b>Хасбулатов С.В., Андрюшин К.П., Омаров З.Х., Резниченко Л.А.</b> Диагностика теплофизических свойств мультиферроика феррита висмута, модифицированного редкоземельными элементами.....	60
<b>Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Хасанов А.И., Черкесова Н.В., Мустафаев А.Г.</b> Влияние характеристик отмывочных жидкостей на степень очистки кремниевых пластин.....	65
<b>Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Хасанов А.И., Черкесова Н.В., Мустафаев А.Г.</b> Формирование малоразмерных контактов на основе слоя вольфрама.....	70
<b>Шомахов З.В., Налимова С.С.</b> Исследование состава поверхности легированных наностержней оксида цинка.....	75
<b>Джамбулатов Р.С.</b> Экспериментальные исследования свойств поверхности в системе вода-ацетон-диоксан и боковых двойных системах.....	80
<b>Калмыков Р.М., Кармоков А.М., Лысенко А.Г., Хасанов А.И.</b> Электронно-микроскопические исследования матрицы PbTe с примесями CdSe.....	85
<b>Дышекова А.Х., Кармоков А.М., Хасанов А.И.</b> Состав и структура поверхности раздела монокристалла хлорида натрия и свинца.....	90
<b>Афшагов А.А., Шебзухова М.А., Бжихатлов К.Ч.</b> Поверхностное натяжение в двухкомпонентных металлических системах.....	95
<b>Малкондуев Ю.А., Кокоева А.А.</b> Сополимеры на основе N-винилпирролидона и галогенсодержащих соединений акриловых кислот.....	99

<b>Мараева Е.В., Халугарова К., Мошников В.А.</b> Композитные антибактериальные структуры на основе гидроксиапатита и оксида цинка.....	<b>104</b>
<b>Калажоков З.Х., Гогия А.Р., Калажоков Х.Х., Зигалов А.Х., Мамиков Р.З.</b> Оценка толщины поверхностного адсорбционного слоя бинарных сплавов щелочных металлов.....	<b>110</b>
<b>Калажоков З.Х., Гогия А.Р., Калажоков Х.Х., Жамбеков А.Х.</b> Оценка толщины поверхностного адсорбционного слоя $\delta_0$ по данным РФЭС измерений.....	<b>113</b>
<b>Кузамишев А.Г., Шебзухова М.А., Бжихатлов К.Ч.</b> Размерная зависимость теплоты плавления наночастиц сферической формы на границе твердое-жидкость.....	<b>116</b>
<b>Смирнов М.В., Сидоров Н.В., Палатников М.Н., Пикулев В.Б.</b> Люминесценция с поверхности номинально чистых кристаллов ниобата лития разного генезиса.....	<b>120</b>
<b>Джангаров А.И., Гишлакаев С.У.</b> Цифровые технологии для мониторинга сельскохозяйственного процесса.....	<b>126</b>
<b>Себаева З.Ш.</b> Современные инновационные технологии преподавания курса физики в области образования.....	<b>130</b>

## ВЛИЯНИЕ ТРЕХЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ФОНОННЫЕ ЧАСТОТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРИПТОНА В МОДЕЛИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ АТОМОВ

**Е.Е. Горбенко,**

*кандидат физико-математических наук, доцент, директор Института физико-математического образования, информационных и обслуживающих технологий ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный педагогический университет», г. Луганск  
e\_g81@mail.ru*

**Е.А. Пилипенко,**

*кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела фазовых превращений ГУ ДНР «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», г. Донецк  
pilipenko.katerina@mail.ru*

**Аннотация.** В модели деформируемых атомов представлены *ab initio* расчеты фононных частот сжатого кристаллического Kr с учетом многочастичного взаимодействия. В потенциале отталкивания, наряду с трехчастичным взаимодействием, связанным с перекрытием электронных оболочек атомов, исследуются трехчастичные силы, обусловленные взаимной деформацией электронных оболочек соседних атомов в дипольном приближении. Показано, что учет деформации электронных оболочек атомов дипольного типа приводит к «размягчению» продольной моды в точках L и X, поперечной моды  $T_1$  в направлении  $\Sigma$  и в точке L при больших сжатиях. Рассмотренные трехчастичные силы усиливают этот эффект. Получено хорошее согласие теоретических фононных частот с имеющимися их экспериментальными значениями при нулевом давлении.

**Ключевые слова:** кристаллы инертных газов, многочастичное взаимодействие, деформация электронных оболочек, высокое давление, фононные частоты, абсолютная неустойчивость.

## INFLUENCE OF THREE-BODY INTERACTION ON THE PHONON FREQUENCIES OF CRYSTALLINE KRYPTON IN THE MODEL OF DEFORMABLE ATOMS

**Ie.Ie. Gorbenko,**

*PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Director of the Institute of Physics and Mathematics Education, Information and Service Technologies of Lugansk State Pedagogical University, Lugansk*

**E.A. Pilipenko,**

*PhD in Physics and Mathematics, Senior Researcher, Department of Phase Transformations of Donetsk A.A. Galkin Institute for Physics and Technology, Donetsk*

**Abstract.** *Ab initio* calculations of phonon frequencies of compressed Kr crystals have been performed taking into account the many-body interaction in the model of deformable atoms. In the short-range repulsive potential, along with three-body interaction associated with the overlap of the electron shells of atoms, the three-body forces generated by the mutual deformation of the electron shells of the nearest-neighbor atoms have been investigated in the dipole approximation. It is shown that the allowance for the deformation of the dipole-type electron shells of atoms in the pair and three-body approximations leads to softening of the longitudinal mode at the points L and X is observed, the transverse mode  $T_1$  is softened in the direction  $\Sigma$  and at the point L at high compressions. This effect is enhanced by the three-body forces. There is a good agreement between the theoretical phonon frequencies and the experimental values at zero pressure.

**Keywords:** rare-gas crystals, many-body interactions, deformation of the electron shells, high pressure, phonon frequencies, absolute instability.

### Введение

Кристаллы инертных газов (КИГ) – простейшие молекулярные кристаллы, которые удерживаются сравнительно слабыми силами Ван-дер-Ваальса, благодаря чему они используются в качестве стандартных тестовых объектов во многих теоретических исследованиях более сложных многофункциональных материалов [1-3]. КИГ являются первичной составляющей атмосфер звезд и планет. Их поведение в экстремальных условиях важно для понимания внутренней структуры, формирования и эволюции этих астрофизических объектов. Следовательно, изучение динамических свойств КИГ в условиях высокого давления представляет научный интерес.

Интенсивное экспериментальное изучение атомных свойств КИГ связано с развитием технологий, позволяющих в лабораторных условиях добиваться высоких давлений [4,5]. Применение для изучения фоновых спектров метода неупругого рассеяния рентгеновских лучей (inelastic-x-rayscattering – IXS) вместо спектроскопических методов неупругого нейтронного рассеяния дает возможность использовать технику ячеек алмазных наковален и поэтому расширить диапазон давлений до 100 GPa и выше [6].

Основная тенденция современных работ по *abinitio* расчетам на основе теории функционала плотности (density functionaltheory – DFT) заключается в том, чтобы как можно более точно описать слабосвязанные молекулярные комплексы системы инертных газов, видоизменяя обменно-корреляционный потенциал. Предполагается, что увеличение плотности заряда в результате сжатия приведет к улучшению используемых приближений. Следуя [7,8], это связано с тем, что DFT не способна рассчитать с достаточной точностью два вида дисперсионных сил: дальнедействующее взаимодействие Ван-дер-Ваальса и эффекты перекрытия в короткодействующем потенциале отталкивания. Следовательно, важно рассчитать широкий круг динамических характеристик сжатых КИГ из первых принципов в едином подходе, позволяющем получить как многочастичное взаимодействие в короткодействующем потенциале отталкивания, так и взаимодействие Ван-дер-Ваальса, которое представляет собой результат взаимного деформирующего и поляризующего действия атомов друг на друга.

На основе квантово-механической модели деформируемых и поляризуемых атомов (модель Толпыго) (см., например, [9]) в настоящей работе проводится *abinitio* расчет фоновых частот и исследуется влияние трехчастичного взаимодействия в короткодействующем потенциале отталкивания и деформации электронных оболочек атомов в парном и трехчастичном приближениях на абсолютную неустойчивость в сжатом кристаллическом криптоне в широком интервале давления.

### Расчёт фоновых частот с учетом трехчастичных сил и деформации электронных оболочек в дипольном приближении

В модели Толпыго потенциальная энергия решетки  $U$  получена путем нахождения  $\bar{H}$  по вариационным параметрам  $c_i^l$  и  $c_{ij}^{ll'}$ , описывающим слабую деформацию электронной волновой функции, при произвольных фиксированных смещениях ядер  $\mathbf{u}^l$  и произвольных дипольных моментах  $\mathbf{P}^l$  [9]

$$U = \min \bar{H} = \text{const} + \sum_l \left\{ \frac{(\mathbf{P}^l)^2}{2\alpha} + \mathbf{P}^l \cdot \mathbf{P}^l - \frac{1}{2} \sum_{l'} \frac{C}{|\mathbf{r}^{ll'}|^6} + \frac{1}{2} \sum_{l'} K(\mathbf{P}^l, \mathbf{P}^{l'}) + \frac{1}{2} \sum_{l'}^{n,n} U_{sr}(|\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{l'}|) \right\}. \quad (1)$$

Первые два слагаемые в (1) описывают деформацию электронных оболочек в дипольном приближении (где  $\alpha$  – поляризуемость). Третье слагаемое дает силы Ван-дер-Ваальса.  $K$  –

кулоновское взаимодействие всех диполей  $\mathbf{P}^l$  между собой. Последнее слагаемое в (1) представляет короткодействующее отталкивание  $E_{sr}$ .

Уравнения колебаний решетки для смещений атомов  $\mathbf{u}^l$  и их дипольных моментов  $\mathbf{P}^l$  можно записать в виде:

$$m\ddot{u}_\alpha^l = -\frac{\partial U}{\partial u_\alpha^l}, \quad \frac{\partial U}{\partial P_\alpha^l} = 0, \quad (2)$$

где  $m$  – масса электрона.

[1] В [10]

предложен метод представления короткодействующего потенциала отталкивания  $E_{sr}$  в виде разложения по степеням малого параметра – интеграла перекрытия волновых функций электронов соседних атомов  $S$ .

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

[3] В

выражении (3) первое  $E^{(0)}$  и второе  $W_2$  слагаемые содержат только одно- и двухцентровые интегралы и соответствуют парному взаимодействию. Слагаемое  $W_3$  – представляет собой поправку третьей степени по  $S$ ; это слагаемое содержит трехцентровые интегралы и соответствует трехчастичным взаимодействиям. Поправка четвертой степени по  $S$  –  $W_4$  – смешанного типа. Она состоит из одно-, двух-, трех- и четырехцентровых интегралов. Поправка пятой степени  $W_5$  состоит только из трехцентровых интегралов, а поправка шестой степени  $W_6$  – только из двухцентровых. Каждый из перечисленных интегралов умножается на  $S$  в соответствующей степени.

[4] Двухцентровые кулоновские интегралы точно рассчитаны на основе таблиц Клементи и Роеитти [11]. Полученные при этом закономерности были использованы для аппроксимации трех- и четырехцентровых интегралов произведениями соответствующих интегралов перекрытия.

[5] Для случая, когда атомы  $l, l', l''$  образуют равносторонний треугольник и при  $S \ll 1$ , трехчастичный потенциал  $W_3$  можно привести к простой форме, а именно

$$W_3 = -\sum_{ll'l''} \left( S(r^{ll''}) \right)^2 f(r_1), \quad f(r_1) = \frac{S(r_1)}{r_1}, \quad r_1 = \left| \mathbf{r}^{l'} - \frac{1}{2} \mathbf{r}^{l''} \right|, \quad (4)$$

где  $S = S_{np_z np_z}^{ll'}$  – наибольший из интегралов перекрытия между внешними  $np$ -орбиталями электронов. В отличие от парного потенциала  $W_2(r^{ll'})$ , трехчастичный потенциал  $W_3$  зависит не только от  $r^{ll'}$  и  $r^{ll''}$ , но и от  $(\mathbf{r}^{ll'} \cdot \mathbf{r}^{ll''})$ . Аргумент функции  $f(r_1)$  представляет собой медиану рассматриваемого треугольника  $l, l', l''$ . В данном случае  $r_1 = r^{ll''} \cdot \cos \frac{\pi}{6} = a \frac{\sqrt{6}}{2}$ .

Дифференцируя уравнения (2), подставляя все переменные  $\mathbf{p}^l = e\mathbf{u}^l$ ,  $\mathbf{P}^l$  в виде плоских волн  $\exp\{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t\}$  и суммируя по  $ll''$ , можно получить уравнения для амплитуд  $p_\alpha, P_\alpha$  с учетом рассмотренного трехчастичного взаимодействия.

В уравнениях колебаний решетки наряду с короткодействующими трехчастичными силами, обусловленными перекрытием электронных оболочек атомов [10], рассматриваем трехчастичное взаимодействие, связанное с деформацией электронных оболочек [12]. Выражения для квадратов собственных частот в симметричных направлениях волнового вектора  $\mathbf{k}$  с учетом всех рассмотренных трехчастичных сил приведем в безразмерных переменных  $\Omega$  и  $\mathbf{k}$ .

Для направления [001]:

$$\Omega_L^2 = 2(G + H)(1 - \cos k_z) + 2(F + E) \sin^2 k_z + B\chi_{zz} + \left[ A_1 - \frac{(2h + 2g)^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}} \right] (1 - \cos k_z)^2.$$

$$\Omega_T^2 = (G + 2H + V_t)(1 - \cos k_z) + 2F \sin^2 k_z + B\chi_{xx} + \left[ B_1 - \frac{(2h + g)^2}{A^{-1} - \varphi_{xx}} \right] (1 - \cos k_z)^2. \quad (5)$$

Для направления [111]:

$$\Omega_L^2 = (4G + 3H + 2E + 6F + V_t) \sin^2 k_z + B(\chi_{xx} + 2\chi_{xy}) + \left[ A_2 - \frac{(3h + 4g)^2}{A^{-1} - 2\varphi_{xy}} \right] \sin^4 k_z.$$

(6)

$$\Omega_T^2 = (G + 3H + 2E + 6F) \sin^2 k_z + B(\chi_{xx} - \chi_{xy}) + \left[ B_2 - \frac{(3h + g)^2}{A^{-1} + \varphi_{xy}} \right] \sin^4 k_z.$$

Для направления [110]:

$$\Omega_L^2 = (H + 2G + 2E + 4F) \sin^2 k_x + (2H + G + V_t)(1 - \cos k_x) +$$

$$+ \left[ C_1 - \frac{(h + 2g)^2}{A^{-1} - \varphi_{xx} - \varphi_{xy}} \right] \sin^4 k_x + \left[ C_2 - \frac{2(h + 2g)(2h + g)}{A^{-1} - \varphi_{xx} - \varphi_{xy}} \right] (1 - \cos k_x) \sin^2 k_x +$$

$$+ \left[ C_3 - \frac{(2h + g)^2}{A^{-1} - \varphi_{xx} - \varphi_{xy}} \right] (1 - \cos k_x)^2 + B(\chi_{xx} + \chi_{xy}).$$

$$\Omega_{T_1}^2 = (H + 2E + 4F) \sin^2 k_x + (G + 2H)(1 - \cos k_x) +$$

$$+ \left[ D_1 - \frac{h^2}{A^{-1} - \varphi_{xx} + \varphi_{xy}} \right] \sin^4 k_x + \left[ D_2 - \frac{2h(2h + g)}{A^{-1} - \varphi_{xx} + \varphi_{xy}} \right] (1 - \cos k_x) \sin^2 k_x +$$

$$+ \left[ D_3 - \frac{(2h + g)^2}{A^{-1} - \varphi_{xx} - \varphi_{xy}} \right] (1 - \cos k_x)^2 + B(\chi_{xx} - \chi_{xy}).$$

$$\Omega_{T_2}^2 = (H + 4F + V_t) \sin^2 k_x + 2(G + H)(1 - \cos k_x) +$$

$$+ \left[ F_1 - \frac{h^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}} \right] \sin^4 k_x + \left[ F_2 - \frac{4h(h + g)}{A^{-1} - \varphi_{zz}} \right] (1 - \cos k_x) \sin^2 k_x +$$

$$+ \left[ F_3 - \frac{4(h + g)^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}} \right] (1 - \cos k_x)^2 + B\chi_{zz}. \quad (7)$$

В выражениях (5)–(7)  $H = H_0 + \delta H$ ,  $G = G_0 + \delta G$ , где  $H_0(a\sqrt{2})$  и  $G_0(a\sqrt{2})$  являются первой и второй производными короткодействующего парного потенциала отталкивания для равновесных расстояний первых соседей; аналогично для вторых соседей  $F = H_0(2a)$  и  $E = G_0(2a)$ ;  $B$  определяет взаимодействие Ван-дер-Ваальса;  $h$  и  $g$  – параметры деформации электронных оболочек атомов дипольного типа в парном приближении;  $\chi_{xx}$ ,  $\chi_{xy}$ ,  $\chi_{xz}$  – функции  $\mathbf{k}$ , происходящие от ван-дер-ваальсовских сил;  $\varphi_{xx}$ ,  $\varphi_{xy}$ ,  $\varphi_{xz}$  – коэффициенты электрического поля, вызванного системой диполей  $\mathbf{P}^i$ ;  $A$  – безразмерная поляризуемость атома [9]. Параметры  $\delta G$ ,  $\delta H$  и  $V_t$  представляют собой трехчастичные короткодействующие силы, обусловленные перекрытием электронных оболочек (недеформированных) атомов [10]. Параметры  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $D_i$  – трехчастичные силы, связанные со взаимной деформацией электронных оболочек. Эти слагаемые не дают новой зависимости от  $\mathbf{k}$  по сравнению с



рассмотренной ранее «парной» деформацией электронных оболочек в дипольном приближении. Параметры, необходимые для расчета фононных частот в зависимости от сжатия  $u = \Delta V / V_0$  ( $\Delta V = V(p \neq 0) - V_0$ , где  $V_0$  – объем при нулевом давлении) представлены в работе [12].

### Расчет фононных частот Kr в широком интервале давлений

На рисунке 1 представлены рассчитанные нами фононные частоты для Kr при  $p=0$ . Для сравнения мы приводим результаты, полученные в работе [13] на основе расширенного потенциала Леннарда-Джонса и наши предыдущие расчеты [14] без учета трехчастичных сил. Согласие наших расчетов с экспериментом [15] хорошее. Видно, что результаты расчетов [13] хуже согласуются с экспериментом.

На рисунке 1 представлены фононные частоты  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$  в симметричном направлении волнового вектора  $\mathbf{k}$  для Kr при сжатии  $u = 0.68$ . Три группы кривых соответствуют трем вариантам расчетов  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ : в модели  $MT_0$  учитывается трехчастичное взаимодействие за счет перекрытия электронных оболочек атомов ( $\delta G \neq 0$ ,  $\delta H \neq 0$ ,  $V_i \neq 0$ ), но не рассматривается их деформация ( $A_i = B_i = D_i = 0$ ,  $g = h = 0$ ); в модели  $MT_1$  добавляется учет деформации электронных оболочек в «парном» приближении ( $A_i = \dots = D_i = 0$ ,  $g \neq 0$ ,  $h \neq 0$ ); в модели  $MT_2$  учитываются все рассмотренные трехчастичные силы и деформация электронных оболочек атомов ( $\delta G \neq 0$ ,  $\delta H \neq 0$ ,  $V_i \neq 0$ ,  $A_i \neq 0 \dots D_i \neq 0$ ,  $g \neq 0$ ,  $h \neq 0$ ).

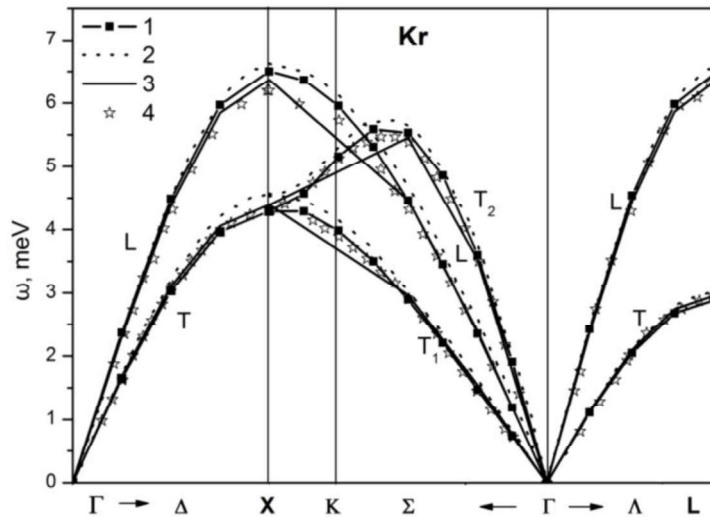


Рис. 1. Фононные дисперсионные кривые для Kr в симметричных направлениях волнового вектора  $\mathbf{k}$  при  $p=0$ . 1 – расчеты настоящей работы в модели  $MT_2$  с учетом всех рассмотренных трехчастичных сил; 2 – расчет с расширенным потенциалом Леннарда-Джонса [13]; 3 – расчеты с учетом деформации электронных оболочек без учета трехчастичных сил (модель М3а) [14]. 4 – эксперимент [15].

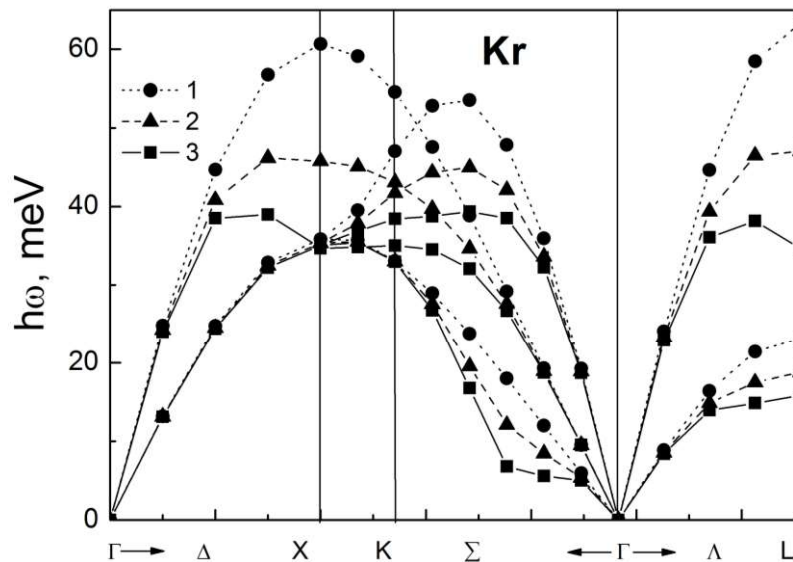


Рис. 2. Фононные дисперсионные кривые в симметричных направлениях волнового вектора  $\mathbf{k}$  для Kr при  $u = 0.68$ . Расчеты: 1 – в модели  $MT_0$ ; 2 – в модели  $MT_1$ ; 3 – в модели  $MT_2$

Из рисунка 2 видно, что в продольной моде в точках X и L, поперечной моды  $T_1$  в направлении [110] и вырожденной поперечной моды T в точке L присутствует «размягчение» фононных частот, что свидетельствует о динамической нестабильности Kr. Наибольшее «размягчение» получается при учете деформации электронных оболочек в парном и трехчастичном приближениях (модель  $MT_2$ ).

В таблице 1 представляет численные значения  $\hbar\omega_{\lambda\mathbf{k}}$  при различном сжатии в тех точках зоны Бриллюэна, где визуально наблюдается наибольшее «размягчение» фононных частот. Сравнение моделей  $MT_2$  и  $MT_0$  ( $\gamma$ ) показывает, что вклад деформации электронных оболочек в парном и трехчастичном приближениях увеличивается с ростом давления. В скобках даны результаты расчетов энергии фононов  $\hbar\omega_{\lambda\mathbf{k}}$  в модели M2 (без учета трехчастичных сил и деформации электронных оболочек) и в модели M2a (без трехчастичных сил, но с учетом деформации электронных оболочек в парном приближении) [16]. Сравнение значений фононных частот Kr ( $u = 0.6$ ), полученных в моделях  $MT_0$  и M2, показывает, что энергия фононов растет при включении трехчастичных сил, обязанных перекрытию электронных оболочек для всех сжатий. Результаты расчетов в моделях  $MT_2$  и M2a показывают уменьшение  $\hbar\omega_{\lambda\mathbf{k}}$  при учете трехчастичных сил за счет деформации электронных оболочек, которое компенсируется ростом в модели  $MT_0$ . Следовательно, получаются значения  $\gamma$  близкие к рассчитанным ранее с парным неэмпирическим потенциалом [16].

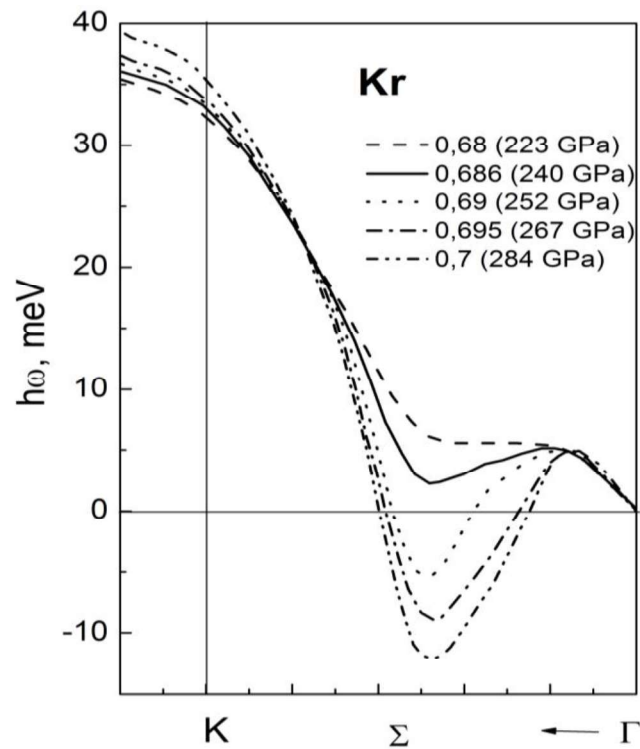


Рис. 3. Фононная дисперсия частот поперечной ветви  $T_1$  в направлении  $\Sigma$  для Kr при различных сжатиях  $u = \Delta V / V_0$  (давлениях  $P$ )

На рисунке 3 показано размягчение «критических» колебаний поперечной ветви  $T_1$  в направлении  $\Sigma$  для Kr. Сплошная линия – рассчитанные минимальные значения  $\hbar\omega_{\lambda k}(u)$  при указанных на рисунке 2 сжатиях. Будем считать эти сжатия и соответствующие им давления критическими  $p_c$ . При больших сжатиях частота становится мнимой. Из рисунка видно, что при давлениях больше критических  $p > p_c$  и соответствующих им сжатиях равным 0.686 ( $p_c = 240$  GPa) для Kr  $\hbar\omega_{\lambda k} \rightarrow 0$  и наступает абсолютная неустойчивость.

Таблица 1

Частоты  $\hbar\omega_{\lambda k}$  [meV] в моделях  $MT_0(M2)$  и  $MT_2(M2a)$  и относительный вклад трехчастичного взаимодействия и эффектов деформации электронных оболочек  $\gamma$  [%] при различных степенях сжатия для КИГ в «критических» точках

Теория		$\hbar\omega_{\lambda k}$ в модели $MT_0(M2)$			$\hbar\omega_{\lambda k}$ в модели $MT_2(M2a)$			$\gamma, \%$		
<b>Kr</b>										
u		0.3	0.6	0.68	0.3	0.6	0.68	0.3	0.6	0.68
p, GPa										
<b>k, λ</b>		5.771	93.455	222.995	5.771	93.455	222.995	5.771	93.455	222.995
X [0;0;1]	L	15.220 (14.94)	42.390 (41.85)	60.684	14.577 (14.6)	33.198 (36.45)	34.671	4.22 (2.31)	21.68 (12.89)	42.87
	T	9.461 (9.77)	25.162 (26.23)	35.811	9.373 (9.62)	24.66 (26.6)	35.063	0.93 (1.45)	2 (1.4)	2.09
L[1/2;1/2;1/2]	L	15.504 (15.15)	43.965 (42.86)	63.337	14.807 (14.83)	33.889 (38.28)	34.627	4.49 (2.12)	22.92 (10.69)	45.33
	T	6.164 (6.19)	16.192 (15.65)	23.172	6.163 (6.18)	15.142 (15.96)	15.830	0.02 (0.18)	6.48 (1.98)	31.68
<b>k</b> [3/8;3/8;0]	$T_1$	4.632	12.349	17.989	4.625	10.887	6.809	0.51	11.84	62.15

Примечание.  $\gamma = \left[ (\omega(MT_0) - \omega(MT_2)) / \omega(MT_0) \right] \cdot 100\%$ . (В скобках даны значения частот рассчитанных в моделях M2 и M2a и соответствующие значения  $\gamma$  [16])

## Заключение

Трехчастичные силы, за счет перекрытия электронных оболочек, малы как при нулевом, так и ненулевом давлении. Кроме этого, в настоящей работе оценивалась роль трехчастичных сил, обусловленных взаимной деформацией электронных оболочек. Эти эффекты оказались более значительными. Они ярко проявились в «размягчении» фононных мод в ГЦК-криптоне при соответствующих сжатиях.

Общий подход [17] к построению адиабатического потенциала  $U$  для КИГ позволяет выяснить наиболее важные взаимодействия в них. Обоснованная достаточно точная форма адиабатического потенциала, полученная ранее в предположении парного межатомного взаимодействия [18,19], была обобщена на случай для  $n$ -атомного взаимодействия [10]. Развита теория позволяет вычислить короткодействующий потенциал отталкивания индивидуально для каждого кристалла ряда Ne-Xe с учетом многочастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек атомов.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Kwon I., Collins L.A., Kress J.D., and Troullier N. First-principles study of solid Ar and Kr under high compression // *Phys.Rev.B.* – 1995. – V.52. – P. 15165-15169.
2. Bucko T., Hafner J., Lebegue S., Angyan J. Improved Description of the Structure of Molecular and Layered Crystals: *Ab initio* DFT Calculations with van der Waals Corrections // *J.Phys.Chem.A.* – 2010 – V.114. – P. 11814-11824.
3. Tran F., Kalantari L., Traoré B., Rocquefelte X., and Blaha P. Nonlocal van der Waals functionals for solids: Choosing an appropriate one // *Phys.Rev.Materials.* – 2019. – V.3. – P. 063602-063604.
4. Hemley R.J. and Ashcroft H.K. The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // *Phys.Today.* – 1998. – V.51. – N 8. – P. 26-32.
5. Shimizu H., Saitoh N., and Sasaki S. High-pressure elastic properties of liquid and solid krypton to 8 GPa // *Phys.Rev.B.* – 1998. – V.57. – P. 230-233.
6. Krish M. Status of phonon studies at high pressure by inelastic x-ray scattering // *J. Raman Spectrosc.* – 2003. – V.34. – P.628-632.
7. Schwerdtfeger P., Hermann A. Equation of state for solid neon from quantum theory // *Phys.Rev.B.* – 2009. V.80. P. 064106-064110.
8. Schwerdtfeger P., Steenbergen K.G., and Pahl E. Relativistic coupled-cluster and density-functional studies of argon at high pressure // *Phys.Rev.B.* – 2017. – V.95. – P. 214116-214120.
9. Троицкая Е.П., Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А. Многочастичное взаимодействие и деформация электронных оболочек атомов в динамике решетки сжатых атомарных криокристаллов // *ФНТ.* – 2016. – Т.42. – С. 526-537.
10. Троицкая Е.П., Чабаненко Вал.В., Жихарев И.В., Горбенко Е.Е. *Abinitio* теория многочастичного взаимодействия и соотношения Коши в сжатых кристаллах инертных газов // *ФТТ.* – 2011. – Т.53. – С. 1555-1563.
11. Clementi F., Roetti C. Roothan-Hartree-Fock atomic wave functions // *At.Data Nucl.Data Table.* – 1974. – V.14. – P. 177-478.
12. Троицкая Е.П., Чабаненко В.В., Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А. *Ab initio* теория многочастичного взаимодействия и фононные частоты кристаллов инертных газов под давлением в модели деформируемых атомов // *ФТТ.* – 2015. – Т.57. – С. 114-123.
13. Moyano G.E., Schwerdtfeger P., and Rosciszewski K. Lattice dynamics for fcc rare gas solids Ne, Ar, and Kr from *ab initio* potentials // *Phys.Rev.B.* – 2007. – V.75. P. 024101-024106.
14. Троицкая Е.П., Чабаненко В.В., Горбенко Е.Е. Элементарные колебания в кристаллах инертных газов: фононные частоты сжатых кристаллов ряда Ar-Xe // *ФТТ.* – 2006. – Т.48. – С. 695-699.
15. Skalyo J., Endoh Y., and Shirane G. Inelastic neutron scattering from solid krypton at 10 °K // *Phys.Rev.B.* – 1974. – V.9. – P. 1797-1803.

16. Троицкая Е.П., Чабаненко В.В., Горбенко Е.Е. Динамическая матрица и фононы в кристаллах инертных газов при высоких давлениях // ФТВД. – 2006. – Т.16. – № 1. – С. 25-37.
17. Троицкая Е.П., Чабаненко Вал.В., Жихарев И.В., Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А. Квадрупольная деформация электронных оболочек в динамике решетки сжатых кристаллов инертных газов // ФТТ. – 2012. – Т.54. – С. 1179-1186.
18. Zarochentsev E.V., Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Horbenko E.E. Interatomic potential and elastic constants of rare-gas crystals under pressure // Phys.Stat.Sol.B. – 2006. –V.243. – P. 2672-2686.
19. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Уравнение состояния кристаллов инертных газов вблизи металлизации // ФТТ. – 2001. – Т.43. – С. 1292-1298.

УДК 539.12/17      DOI: 10.36684/42-2021-1-26-35

## ИЗЛУЧЕНИЕ УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ И ПОЗИТРОНОВ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ В КРИСТАЛЛАХ И ПОЛЯХ МОЩНЫХ ЛАЗЕРОВ

**М.Х. Хоконов,**

*доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической и экспериментальной физики, ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова», г. Нальчик*

*khokon6@mail.ru*

**И.З. Бекулова,**

*старший преподаватель кафедры теоретической и экспериментальной физики (гнд), ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова», г. Нальчик*

*indbekul@mail.ru*

**В.С. Ломаносов,**

*аспирант,*

*ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова», г. Нальчик*

*slavaloman@bk.ru*

**Аннотация.** Изучены нелинейные эффекты в излучении ультрарелятивистских электронов в поле линейно-поляризованной интенсивной лазерной волны в сравнении с излучением при плоскостном каналировании позитронов в ориентированных кристаллах. Показано, что формулы для спектра излучения могут быть представлены в универсальной форме, которая определяется двумя Лоренц-инвариантами. Учитываются квантовые эффекты в излучении. Показаны и существенные отличия лазеров и ориентированных кристаллов, связанные с тем, что в последнем случае параметр недипольности излучения зависит от энергии позитронов.

**Ключевые слова:** мощные лазеры, ориентированные кристаллы, излучение при каналировании, параметр Швингера.

## RADIATION OF ULTRA-RELATIVISTIC ELECTRONS AND POSITRONS DURING CHANNELING IN CRYSTALS AND IN THE FIELDS OF POWERFUL LASERS

**M.Kh. Hokonov,**

*Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Head of the Department of Theoretical and Experimental Physics, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Kabardino-Balkarian State University named after Kh.M. Berbekov" Nalchik*