

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ЛУГАНСКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ**

В Е С Т Н И К

**«ЛУГАНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени ВЛАДИМИРА ДАЛЯ»**

**№ 5(47)
2021**

**МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
"ОТКРЫТЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2021"**

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Луганск 2021

ВЕСТНИК

ЛУГАНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ

№ 5 (47) 2021

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
ОСНОВАН В 2015 ГОДУ
ВХОДИТ В БАЗУ
РИНЦ

ОСНОВАТЕЛЬ
ГОУ ВО ЛНР «ЛУГАНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации,
печати и массовых коммуникаций
Серия № ПИ 000170 от 19 января 2021 г.

Свидетельство о государственной регистрации
Издателя, изготовителя и распространителя средства
массовой информации
МИ-СРГ ИД 000003 от 20 ноября 2015г.

Журнал включен в перечень научных изданий ВАК ЛНР (Приказ № 8-ОД от 8.01.19) в котором могут публиковаться результаты диссертационных работ на соискание ученой степени доктора и кандидата физико-математических, химических, технических, экономических, исторических, философских, филологических, юридических, педагогических, психологических, социологических наук.

ISSN 2522-4905

Главная редакционная коллегия :

Рябичев В.Д., докт. техн. наук, (главный редактор),
Гутько Ю.И., докт. техн. наук, (зам. главн. редактора),
Витренко В.А., докт. техн. наук (зам. главн. редактора),
Авершин А.А., канд. психол. наук,
Андрійчук Н.Д., докт. техн. наук,
Атоян А.И., докт. филос. наук,
Белых А.С., докт. пед. наук,
Бельдюгин В.А. канд. ист. наук,
Болдырев К.А., докт. экон. наук,
Будиков Л.Я., докт. техн. наук,
Губачева Л.А., докт. техн. наук,
Дейнека И.Г., докт. техн. наук,
Дрозд Г.Я., докт. техн. наук,
Ерошин С.С., докт. техн. наук,
Замота Т.Н., докт. техн. наук,
Исаев В.Д., докт. филос. наук,
Клименко А.С., докт. филол. наук,
Коваленко А.А., канд. техн. наук, проф,
Кривоколыско С.Г., докт. хим. наук,
Крохмалева Е.Г., канд. пед. наук,
Корсунов К.А., докт. техн. наук,
Лазор В.В., докт. юридич. наук,
Лазор Л.И., докт. юридич. наук,
Лустенко А.Ю., докт. филос. наук,
Ляпин В.П., докт. биол. наук,

Максимова Т.С., докт. экон. наук,
Максимов В.В., докт. экон. наук,
Мечетный Ю.Н., докт. мед. наук,
Мирошников В.В., докт. техн. наук,
Мортиков В.В., докт. экон. наук,
Нечаев Г.И., докт. техн. наук,
Панайотов К.К., канд. техн. наук,
Родионов А.В., докт. экон. наук,
Рябичева Л.А., докт. техн. наук,
Салита С.В., докт. экон. наук,
Санжаров С.Н., докт. ист. наук,
Свиридова Н.Д., докт. экон. наук,
Семин Д.А., докт. техн. наук,
Скляр П.П., докт. психол. наук,
Слащев В.А., канд. техн. наук, проф,
Тарарычкін І.А., докт. техн. наук,
Тисунова В.Н., докт. экон. наук,
Утутов Н.Л., докт. техн. наук,
Фесенко Ю.П., докт. филол. наук,
Харьковский Р.Г. канд. ист. наук,
Шамшина И.И., докт. юридич. наук,
Шелюто В.М., докт. филос. наук,
Яковенко В.В., докт. техн. наук

Ответственный за выпуск: Корсунов К.А.

Рекомендовано в печать Ученым советом Луганского государственного университета имени Владимира Даля.
(Протокол № 1 от 02.10.2020 г.)

Материалы номера печатаются на языке оригинала.

VESTNIK

LUGANSK
VLADIMIR DAHL
STATE UNIVERSITY

№ 5 (47) 2021

THE SCIENTIFIC JOURNAL
WAS FOUNDED IN 2015
INCLUDED INTO THE BASE OF
RISC

FOUNDER
SEE HT LPR
«LUGANSK VLADIMIR DAHL
STATE UNIVERSITY»

Journal is registered by the Ministry of Information,
Publishing and Mass Communications
Series № PI 000170 of January, 19 2021

State Registration Certificate of Publisher, Producer
and Distributor of means of mass information

MI-SRG ID 000003 of November, 20 2015

СОДЕРЖАНИЕ

**СЕКЦИЯ 1.
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

| | |
|--|----|
| АКУСТИЧЕСКИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНОМ 1D ФОНОННОМ КРИСТАЛЛЕ Румянцев В.В., Федоров С.А., Паладян Ю.А.----- | 11 |
| КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РУТЕНИЕВЫХ ТОЛСТОПЛЕНОЧНЫХ РЕЗИСТОРОВ С ИЗМЕНЯЮЩИМСЯ КОЛИЧЕСТВОМ ТОКОПРОВОДЯЩИХ ФАЗ Лозинский Н.С.----- | 17 |
| ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА ТЕМПЛАТНОГО СИНТЕЗА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И НАНОУГЛЕРОДА МЕТОДОМ CVD. ВЛИЯНИЕ МАКРОКИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ПРОЦЕССА, СТРУКТУРЫ КАТАЛИЗАТОРА И НОСИТЕЛЯ НА МОРФОЛОГИЮ УГЛЕРОДНЫХ ПРОДУКТОВ Прудченко А.П., Савоськин М.В., Полякова О.Ю., Бурховецкий В.В., Волкова Г.К., Глазунова В.А.-- | 19 |
| ЕСТЕСТВЕННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА В ОБЛАСТИ ЭКСИТОННОГО РЕЗОНАНСА Румянцев В.В., Федоров С.А., Рыбалка А.Е.----- | 29 |
| ЭВОЛЮЦИЯ ПЕТЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА И СОСТОЯНИЯ ПЬЕЗОАКТИВНОСТИ В СИСТЕМЕ НИОБАТОВ НАТРИЯ - КАЛИЯ - КАДМИЯ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ УСЛОВИЙ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ Мойса М.О., Андрушин К. П., Резниченко Л. А.----- | 34 |
| ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ, ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И СЕГНЕТОЭЛАСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ PZT-CN Андрушин К.П., Шилкина Л.А., Нагаенко А.В., Андрушина И.Н., Дудкина С.И., Резниченко Л.А. -- | 37 |
| ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПЛЁНКАХ $CN_x:EU_yO_z$. Шемченко Е.И., Яковец А.А., Лихтенштейн И.Я.----- | 42 |
| ГИДРОСТРИКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ АНОДОВ И КАТОДОВ АККУМУЛЯТОРНЫХ БАТАРЕЙ НА ОСНОВЕ НИОБАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ Зубарев Я.Ю., Шилкина Л.А., Крутов В.А., Назаренко А.В., Резниченко Л.А.----- | 46 |
| СВЯЗЬ ИСЧИСЛЕНИЯ ВНЕШНИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ФОРМ С МЕТОДОМ ЯКОБИАНОВ И ОСОБЕННОСТИ ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТЕРМОДИНАМИКЕ Шелест В.В., Червинский Д.А.----- | 52 |
| СВЯЗЬ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ С АКУСТИКОЙ Шелест В.В., Червинский Д.А., Христов А.В.----- | 54 |
| СОИНТЕРКАЛАТ НИТРАТА ГРАФИТА С ЭТИЛ- И БУТИЛАЦЕТАТОМ КАК ПРЕДШЕСТВЕННИК УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ Осколкова О.Н., Давыдова А.А., Ракша Е.В., Гнатовская В.В., Сухов П.В., Берестнева Ю.В., Глазунова В.А., Бурховецкий В.В., Волкова Г.К., Савоськин М.В.----- | 57 |
| ГРАФИТОПОДОБНЫЕ ПЛЕНКИ С ВЫСОКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ ПРОВОДИМОСТИ Изотов А.И., Кильман Г.В., Сироткин В.В., Шалаев Р.В.----- | 63 |
| ПРИМЕНЕНИЕ НИОБАТНОЙ СЕГНЕТОПЬЕЗОКЕРАМИКИ В МЕДИЦИНСКОЙ ПРАКТИКЕ Дудкина С.И., Шилкина Л.А., Андрушин К.П., Андрушина И.Н., Вербенко И.А., Резниченко Л.А. -- | 66 |
| ПОВЕДЕНИЕ АНИОННОЙ ВАКАНСИИ В (100) ПЛАСТИНАХ АНАТАЗА РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ Токий Н.В., Токий В.В., Гребенюк Н.А.----- | 70 |

| | |
|---|-----|
| ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ОДНОФАЗНОГО ГИБРИДА ДЛЯ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МЕДИ В ПРИБЛИЖЕНИИ ФОГТА Токий В. В., Токий Н.В.----- | 74 |
| РАСЧЕТ ТОЛЩИНЫ И ОПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПО СПЕКТРАМ ПРОПУСКАНИЯ Жидель К.М., Павленко А.В.----- | 77 |
| ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ Малашенко В.В.----- | 83 |
| ОПТИМИЗАЦИЯ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ НИОБАТА НАТРИЯ-КАЛИЯ ПУТЕМ ПРИМЕНЕНИЯ МЕХАНОАКТИВАЦИИ Глазунова Е.В., Шилкина Л.А., Вербенко И.А., Ситало Е.И., Нагаенко А.В., Резниченко Л.А. ----- | 87 |
| КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ФАЗЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $ABO_3 - LiNbO_3$ ($ABO_3 - BiFeO_3, LaMnO_3$ И $LaFeO_3$) Рудский Д.И., Лебединская А.Р., Кабиров Ю.В., Кофанова Н.Б., Рудская А.Г. ----- | 90 |
| МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА-ВИСМУТА: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И ВОЗМОЖНЫЕ МЕХАНИЗМЫ Волков Д.В., Вербенко И.А., Шилкина Л.А., Павленко А.В., Павелко А.А. ----- | 95 |
| ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И СВОЙСТВА КЕРАМИКИ $(0.5-x)BiFeO_3-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3-xPbTiO_3$ Болдырев Н.А., Ситало Е.И., Шилкина Л.А., Назаренко А.В., Резниченко Л.А. ----- | 98 |
| УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ NE И AR ПОД ДАВЛЕНИЕМ Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А., Ткачева А.О. ----- | 106 |
| ИСТОРИЯ, ПРИМЕНЕНИЕ, ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА $BiFeO_3/Yb$ Хасбулатов С. В., Вахажи Х-М. М., Мацаев М-С.М.----- | 115 |
| ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА $BiFeO_3/La$ Хасбулатов С.В., Вахажи Х-М.М., Лепнев Х.Х ----- | 118 |
| СПЕКТРОСКОПИЯ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $BiFeO_3/Pr$ Абдулмуслимова С.А., Хасбулатов С.В, Корсунов К.А.----- | 122 |
| ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО МУЛЬТИФЕРРОИКА $BiFeO_3/Sm$ Абдулмуслимова С.А., Хасбулатов С.В.----- | 126 |

СЕКЦИЯ 2. ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

| | |
|---|-----|
| МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ГОРЯЧИХ И ХОЛОДНЫХ ПЯТЕН УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО МУТАГЕНЕЗА НА УЧСТКЕ ДВУНИТЕВОЙ ДНК С ОДНОРОДНЫМ НУКЛЕОТИДНЫМ СОСТАВОМ Гребнева Е.А. ----- | 130 |
| ОБОСНОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ УСТРОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ СИСТЕМ И СЕТЕЙ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ Третьяков И.А.----- | 136 |
| ВЛИЯНИЕ НАТЯГА НА ПЛОТНОСТЬ И ОСТАТОЧНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ ПРИ ДОРНОВАНИИ ПОРОШКОВОЙ ПОРИСТОЙ ЗАГОТОВКИ Рябичева Л.А., Решетняк Д.В. ----- | 141 |
| МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОЭЛЕКТРОДНЫХ ПЕЧНЫХ УСТАНОВКАХ Кухарев А.Л. ----- | 146 |

| | |
|--|-----|
| НЕФТЯНОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ВОД В АБХАЗСКОМ СЕКТОРЕ ЧЕРНОГО МОРЯ Гицба Я.В.----- | 151 |
| ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ СДВИГОВ И ПРОСЕДАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД НАД ОТРАБОТАННЫМ ПРОСТРАНСТВОМ ШАХТ ГОРОДА ДОНЕЦКА Несова А.В., Шестакин Н.С., Хархордин Е.В.----- | 155 |
| АНАЛИЗ УСТРОЙСТВ РАВНОМЕРНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ПОТОКА РАБОЧЕЙ ЖИДКОСТИ В ГИДРАВЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ, ИСПОЛЪЗУЕМЫХ В ТЯЖЕЛОМ МАШИНОСТРОЕНИИ И МОБИЛЬНЫХ СЛОЖНОТЕХНИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВАХ Горбунов Р.С., Цурцилина А.Ю., Деркачев И.С.----- | 161 |
| ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАЗРЯДА В ЖИДКОСТИ Сергиенко С.Н., Юрьев С.А., Малюта Е.Р.----- | 165 |
| О ВОЗМОЖНОСТИ НАБЛЮДЕНИЯ ЭФФЕКТА ШВИНГЕРА РОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОН- ПОЗИТРОННЫХ ПАР С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ Никитин Е.В.----- | 171 |
| АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАТЕРИАЛОВ Астафьев П.А.----- | 174 |
| ПЕРСПЕКТИВА ДАЛЬНЕЙШЕГО ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ НАКАЧКИ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРАХ Мурга Е.В., Юрьев С.А., Малюта Е.Р.----- | 180 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК СТОЛБА СТАБИЛИЗИРОВАННОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ДУГИ МЕТОДОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА Калюжный Г.С., Корсунов К.А., Лыштван Е.Ю., Чаленко А.В.----- | 184 |
| ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ САПФИРА, ВОЗБУЖДАЕМАЯ СКОЛЬЗЯЩИМ ВЫСОКОВОЛЬТНЫМ РАЗРЯДОМ Громенко В.М., Харченко Е.И.----- | 188 |
| РАДИАЦИОННАЯ ОЦЕНКА ГОРОДСКИХ ПАРКОВ ГОРОДА ЛУГАНСКА Воробьев С.Г., Чаленко А.В.----- | 190 |
| ОСОБЕННОСТИ ЛАТЕРАЛЬНОГО И РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВАХ ГОРНОЙ АДЫГЕИ Бураева Е.А., Ширяева А.А.----- | 194 |
| РАДИАЦИОННАЯ ОБСТАНОВКА НА РЕКРЕАЦИОННЫХ, УРБАНИЗИРОВАННЫХ И ПРИРОДНО-ТЕХНОГЕННЫХ ТЕРРИТОРИЯХ РОСТОВСКОЙ ОБЛАСТИ Ляхова Н.В., Швецова Д.А., Шадин А.Е., Бураева Е.А., Михайлова Т.А.----- | 198 |
| РАДИОНУКЛИДНЫЙ И ЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВЫ АЭРОЗОЛЬНОЙ ПЫЛИ НА ТЕРРИТОРИИ РОСТОВСКОЙ АГЛОМЕРАЦИИ Михайлова Т.А., Машаров К.С., Бураева Е.А., Кашаева Е.А., Ширяева А.А.----- | 202 |
| МАГНИТНЫЕ ЖИДКОСТИ: СВОЙСТВА И ОСНОВНЫЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ Алиев И. М., Дудаева М.А., Сайд-Ахматова Ф.С., Хапаева М. С.----- | 206 |
| СЕКЦИЯ 3. МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ | |
| РЕАЛИЗАЦИЯ КОМПЕТЕНТНОСТНОГО ПОДХОДА ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ СТУДЕНТАМИ-ФИЗИКАМИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ Корсунов К.А., Харченко Е.И., Чаленко А.В.----- | 217 |

| | |
|--|-----|
| ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УМЕНИЙ СТУДЕНТОВ ФИЗИКОВ В ПРОЦЕССЕ ПРЕДДИПЛОМНОЙ ПРАКТИКИ Харченко Е.И., Чаленко А.В., Лыштван Е.Ю. ----- | 221 |
| ОРГАНИЗАЦИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ФИЗИКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ Горбенко Е.Е., Грицких А.В. ----- | 225 |
| ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ КОМПЕТЕНТНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ Акулов Ю.В., Безверхний А.Л., Грицких А.В. ----- | 228 |
| МЕТОДИКА И ТЕХНОЛОГИИ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ОДАРЕННЫХ ШКОЛЬНИКОВ Воробьев С.Г., Каменев С.А., Чернопятко Е.А., Христиди Т.А., Сорока Н.В. ----- | 233 |
| СОВРЕМЕННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ В УСЛОВИЯХ РАЗВИТИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ Дадашева З.И. Дадашев Р.Р., Мисирова Л.М. ----- | 239 |
| ФОРМИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННО - ДИДАКТИЧЕСКИХ УМЕНИЙ ПЕДАГОГОВ Дадашева З.И. ----- | 242 |
| ПРОФЕССИОНАЛЬНАЯ КОМПЕТЕНТНОСТЬ УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ Дадашева З.И., Дадашев С.И. ----- | 245 |

УДК 539.2.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ Ne И Ar ПОД ДАВЛЕНИЕМ**Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А., Ткачева А.О.****EQUATION OF STATE Ne AND Ar CRYSTALS UNDER PRESSURE****Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Tkacheva A.O.**

Исследуются неэмпирические уравнения состояния сжатых кристаллов неона и аргона на основе адиабатического потенциала. Парный и трёхчастичный короткодействующие потенциалы отталкивания рассчитаны методом Хартри-Фока в базе локализованных функций с точной ортогонализацией их друг к другу и не содержат экспериментально определяемых параметров. Проведено сравнение теории с экспериментом и результатами расчётов других авторов. Анализ предложенных уравнений состояния при больших сжатиях показал важность учёта трёхчастичного взаимодействия и слагаемых с высшими степенями по интегралу перекрытия в сжатом неоне.

Ключевые слова: кристаллы инертных газов, многочастичное короткодействующее взаимодействие, деформация электронных оболочек, уравнение состояния, приближение Хартри-Фока, высокое давление.

Введение. Ne и Ar относятся к лёгким кристаллам инертных газов (КИГ) и являются простейшими молекулярными кристаллами, поэтому их часто используют в качестве модельных объектов для изучения ряда фундаментальных проблем физики твёрдого тела, относящихся к динамике решетки, многоэлектронным эффектам, фазовым превращениям, наук о Земле и планетах, а также для разработки и усовершенствования новых расчетных методов.

Особое внимание привлекает исследование упругих свойств сжатых КИГ, поскольку они применяются в качестве передаточных сред в ячейках алмазных наковален (diamond-anvil cell – DAC). Давление создаваемое в DAC составляет 300 GPa [1] и продолжает увеличиваться, поэтому изучение при высоких давлениях свойств лёгких КИГ представляет научный и практический интерес.

Для анализа данных по состоянию кристалла, подвергнутому большому сжатию необходимо разработать общее уравнение состояния (equation of state – EOS), связывающее конечные деформации кристалла с внешними напряжениями.

При комнатной температуре уравнение состояния кристаллического Ne экспериментально изучалось с использованием техники DAC в работах [2] до $p = 14.4$ GPa, в [3] до $p = 110$ GPa, в [4] до $p = 208$ GPa. В 2010 г. вышла работа [5], в которой

были проведены исследования структуры и уравнения состояния Ne под давлением до 237 GPa.

Теоретические описания изотерм в широкой области давлений основываются на полуэмпирических уравнениях состояния с параметрами, определяемыми при нормальном давлении [6–14]. Наиболее успешным считается уравнение состояния Винета [7] для которого необходимо знание четырёх параметров: 1) изотермического объёмного модуля при нулевом давлении, 2) его производной по давлению, 3) объёма при $p = 0$ и 4) термического расширения при $p = 0$. Надежность этих уравнений ограничена тем давлением, до которого справедливы использованные при их выводе экспериментальные величины и соотношения. В области давлений, пока не доступных эксперименту, предсказательную ценность будут иметь первопринципные EOS.

Ab initio расчёты уравнения состояния КИГ на основе теории функционала плотности (density functional theory – DFT) в приближении локальной плотности (local density approximation – LDA) или обобщенного градиентного приближения (generalized gradient approximation – GGA) для обменно-корреляционного потенциала дают результаты, близкие к эксперименту [15–18]. Причем результаты DFT – LDA лежат несколько ниже экспериментальных данных, а результаты DFT – GGA, наоборот, завышены [18]. Однако, как показано в [16], метод QMC (quantum Monte Carlo method) обеспечивает адекватное описание взаимодействия Ван-дер-Ваальса и EOS, рассчитанное этим методом, хорошо согласуется с экспериментальными результатами.

В работе [19] на основе расчётов из первых принципов адиабатического потенциала получено неэмпирическое уравнение состояния. Энергия парного короткодействующего потенциала отталкивания была рассчитана в приближении Хартри-Фока в базе локализованных функций с точной ортогонализацией их друг к другу и кластерным разложением для ортогонализующей матрицы. Такой способ вычисления ортогонализующей матрицы достигается суммированием определенных

подпоследовательностей ряда по S . Это позволяет снять ограничение $S \ll 1$ и получить EOS и другие характеристики кристаллов при относительных сжатиях $u = \Delta V / V_0$ ($\Delta V = V_0 - V(p)$, $V_0 = V$ при $p = 0$), близких к единице.

Общая форма уравнения состояния. Под уравнением состояния тела в самом общем случае будем понимать связь между тензорами напряжений t_{ij} и дисторсии u_{ij} при заданной температуре (или энтропии, см., например, [20] с. 25–27)

$$t_{ij}(x) = \rho(x) \left[\frac{\partial F(T, x')}{\partial u'_{ij}} \right]_{T, u'=0}, \quad (1)$$

где $\rho(x)$ – плотность вещества в произвольном напряженном состоянии $\{x\}$, $F(T, x')$ – свободная энергия единицы массы при температуре T в состоянии $\{x'\}$, бесконечно мало отличающемся от $\{x\}$.

Свободная энергия $F(x)$ является функцией тензора дисторсии $F(T, x) = F(T, X, u_{ij})$, описывающего переход от начального состояния $\{X\}$ к состоянию $\{x\}$. В общем случае в любой микроскопической модели свободная энергия является функцией объема элементарной ячейки Ω и векторов прямой (\mathbf{R}) и обратной (\mathbf{g}) решеток $F(T, x) = F(\Omega, \mathbf{R}, \mathbf{g})$. Уравнение состояния (1) приобретает форму

$$\Omega \frac{\partial F}{\partial \Omega} - \sum_{\mathbf{g}} g_{\alpha} \frac{\partial F}{\partial g_{\alpha}} + \sum_{\mathbf{R}} R_{\alpha} \frac{\partial F}{\partial R_{\alpha}} = \Omega t_{\alpha\alpha}. \quad (2)$$

Для кристаллов с ГПУ- (или ГЦК)-структурой свободная энергия зависит только от двух параметров: объема ячейки Ω и отношения c/a , и уравнение состояния принимает вид

$$p = - \frac{\partial F(T, \Omega, c/a)}{\partial \Omega}, \quad \frac{\partial F(T, \Omega, c/a)}{\partial (c/a)} = 0. \quad (3)$$

Для кубического кристалла $c/a \equiv 1$, и второе уравнение в (3) обращается в тождество. Выведем уравнение состояния $p(u)$ при $T = 0$, пригодное при больших гидростатических сжатиях. Выражение для энергии кристалла U получим в виде (детали расчета см. в работах [21,22])

$$U = \min \bar{H} = const + \left[\frac{(\mathbf{P}^l)^2}{2\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{2\beta_{44}} (Q'_{\alpha\beta})^2 + \beta^l \cdot \mathbf{P}^l + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D'_{\alpha\beta} Q'_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \sum_r \left[\frac{C}{|\mathbf{r}^{II}|^6} + \frac{C'}{|\mathbf{r}^{II}|^8} + \frac{C''}{|\mathbf{r}^{II}|^{10}} \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_r K(\mathbf{P}^l, Q'_{\alpha\beta}, \mathbf{P}^{II}, Q'_{\alpha\beta}) + \frac{1}{2} \sum_{sr} U_{sr} |\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{II}| \right] \quad (4)$$

В этом выражении \mathbf{P}^l и $Q'_{\alpha\beta}$ – индуцированные движением ядер дипольный и квадрупольный моменты атома в узле \mathbf{I} . Первые четыре члена описывают деформацию электронных оболочек (α и

β_{44} – коэффициенты дипольной и квадрупольной поляризуемостей). Следующие три члена дают силы Ван-дер-Ваальса. K – кулоновское взаимодействие всех диполей \mathbf{P}^l и квадруполей $Q'_{\alpha\beta}$ между собой. Наконец, короткодействующие силы определены формулой

$$E_{sr} = \frac{1}{2} \sum_{l'} U_{sr} |\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{II}| = \sum_{l'} \langle 00 | \hat{H}^{II}_{sr} | 00 \rangle + \\ + \alpha (\beta^l)^2 + \sum_{\alpha\beta} \beta_{44} (D'_{\alpha\beta})^2 - 2 \left(\sum_i \Delta_i \sum_{l'} \langle 00 | \hat{H}^{II}_{sr} | i0 \rangle \right)^2, \quad (5)$$

$$\beta^l = \frac{1}{\alpha} \sum_i \sum_{l'} \frac{\langle 0 | \mathbf{P}^l | i \rangle \langle i0 | \hat{H}^{II}_{sr} | 00 \rangle + c.c.}{E_i - E_0},$$

$$D'_{\alpha\beta} = \frac{1}{\beta_{44}} \sum_i \sum_{l'} \frac{\langle 0 | \hat{Q}'_{\alpha\beta} | i \rangle \langle i0 | \hat{H}^{II}_{sr} | 00 \rangle + c.c.}{E_i - E_0}.$$

Матричные элементы дипольных и квадрупольных моментов:

$$\langle 0 | \mathbf{P}^l | i \rangle = \int \psi'_0 \cdot \mathbf{P}^l \psi'_i d\tau, \quad \langle 0 | \hat{Q}'_{\alpha\beta} | i \rangle = \int \psi'_0 \hat{Q}'_{\alpha\beta} \psi'_i d\tau.$$

Многочастичное короткодействующее взаимодействие в приближении Хартри-Фока. Выражение для энергии кристалла, состоящего из нейтральных атомов, записанное в приближении Хартри-Фока через одноэлектронную матрицу плотности $\rho(\mathbf{r} | \mathbf{r}'; \{\mathbf{I}\})$, где \mathbf{r} – координата электрона, $\{\mathbf{I}\}$ – положение ядер решетки, имеет вид [23]

$$E_{sr} = T_e + U_C + U_{ex} + U_{en} + U_{mn}, \quad (6)$$

где $T_e(\{\mathbf{I}\})$ – кинетическая энергия электронов кристалла; $U_C(\{\mathbf{I}\})$ и $U_{ex}(\{\mathbf{I}\})$ – энергия электрон-электронного кулоновского и обменного взаимодействий; U_{en} и U_{mn} – энергия электрон-ядерного и межъядерного взаимодействий.

В базисе атомных орбиталей, точно ортогонализированных друг к другу по Левдину, матрица плотности $\rho(\mathbf{r}^l | \mathbf{r}; \{\mathbf{I}\})$ примет вид [23,24]

$$\rho(\mathbf{r}^l | \mathbf{r}; \{\mathbf{I}\}) = 2 \sum_{\mathbf{I} s'} \left\{ \begin{aligned} & \varphi_s(\mathbf{r}^l - \mathbf{I}) \varphi_s^*(\mathbf{r} - \mathbf{I}) - \\ & - \sum_{\mathbf{I}' s'} \varphi_{s'}(\mathbf{r}^l - \mathbf{I}') P_{s' s}^{I' I} \varphi_{s'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{I}) \end{aligned} \right\}, \\ \mathbf{P} = \mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{S})^{-1}, \quad (7)$$

где $\varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{I}) = |\mathbf{I} s\rangle$ – волновая функция электрона изолированного атома (атомная орбиталь), центрированная на узле \mathbf{I} решетки кристалла в состоянии с номером s (\mathbf{I} и \mathbf{I}' пробегают все N узлов), \mathbf{P} – ортогонализирующая матрица, \mathbf{I} – единичная матрица, \mathbf{S} – матрица интегралов перекрытия с элементами

$$S_{s' s}^{I' I} = \langle \mathbf{I}' s' | \mathbf{I} s \rangle \text{ при } \mathbf{I}' \neq \mathbf{I}; \quad S_{s' s}^{I' I} = 0 \text{ при } \mathbf{I}' = \mathbf{I}. \quad (8)$$

Записанное через орбитали электронов изолированных атомов $|\mathbf{I} s\rangle$ и ортогонализирующую

матрицу, выражение для энергии короткодействующего отталкивания атомов кристалла будет [24] иметь вид:

$$E_{sr} = E^{(0)} + \Delta E(\mathbf{P}) + \Delta E(\mathbf{P}^2), \quad (9)$$

где $E^{(0)}$ – энергия межатомного взаимодействия в пренебрежении ортогонализацией орбиталей соседних атомов, $\Delta E(\mathbf{P})$ – ортогонализационная поправка, линейная по \mathbf{P} , $\Delta E(\mathbf{P}^2)$ – поправка, квадратичная по \mathbf{P} . В выражении для E_{sr} (9)

$$E^{(0)} = \sum_1 E_a^1 + \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \langle \mathbf{l}s | V_{en}^{\mathbf{m}} + V_0^{\mathbf{m}} + V_{ex}^{\mathbf{m}} | \mathbf{l}s \rangle. \quad (10)$$

Здесь штрих у знака суммы означает $\mathbf{m} \neq \mathbf{l}$; далее по тексту $\mathbf{l} \neq \mathbf{l}' \neq \mathbf{m}$, $\mathbf{l} \neq \mathbf{l}' \neq \mathbf{m} \neq \mathbf{m}'$.

Первое слагаемое в (10) представляет сумму энергий изолированных атомов, не зависящую от межатомных расстояний в кристалле. Ее можно включить в начало отсчета энергии. Второе слагаемое в (10) состоит из двухцентровых интегралов – матричных элементов от потенциала электрон-ионного взаимодействия $V_{en}^{\mathbf{m}}$, потенциала нейтрального изолированного атома $V_0^{\mathbf{m}}$ и потенциала обменного межатомного взаимодействия $V_{ex}^{\mathbf{m}}$, построенных на атомных орбиталях $|\mathbf{l}s\rangle$.

Выражения для энергии кристалла (9) содержат различные типы многоцентровых интегралов, соответствующие различным видам межатомных сил в кристалле. Слагаемое $E^{(0)}$ (10) содержит только парные силы, т.е. двухцентровые интегралы; поправка $\Delta E(\mathbf{P})$ – как двухцентровые интегралы, так и трехцентровые. Поправка $\Delta E(\mathbf{P}^2)$ содержит интегралы, начиная от одноцентровых и кончая четырехцентровыми.

Тогда выражение для энергии E_{sr} (9) электронов кристалла можно записать в виде разложения по степеням интеграла перекрытия S

$$E_{sr} = E^{(0)} + W_2 + W_3 + W_4 + W_5 + W_6. \quad (11)$$

Здесь W_2 – ортогонализационная поправка, квадратичная по S

$$W_2 = -2 \sum_{\mathbf{l}'} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \langle \mathbf{l}'s' | V_0^{\mathbf{l}'} + V_{ex}^{\mathbf{l}'} | \mathbf{l}s \rangle - \sum_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'\mathbf{t}\mathbf{t}'} P_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} P_{\mathbf{t}\mathbf{t}'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} \langle \mathbf{l}s' \mathbf{m}\mathbf{t}' | v_C | \mathbf{m}\mathbf{s}\mathbf{l}\mathbf{t} \rangle. \quad (12)$$

Поправка W_2 содержит только двухцентровые интегралы и соответствует двухчастичным взаимодействиям в кристалле. Слагаемое W_3 – поправка третьей степени по S , содержащая трехцентровые интегралы

$$W_3 = -2 \sum_{\mathbf{l}'} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} (I - S)_{\mathbf{s}'\mathbf{s}}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \varepsilon_{\mathbf{l}s} - 2 \sum_{\mathbf{l}'} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} \left\langle \mathbf{l}'s' \left| \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{l}, \mathbf{m} \neq \mathbf{l}'} (V_0^{\mathbf{m}} + V_{ex}^{\mathbf{m}}) \right| \mathbf{l}s \right\rangle. \quad (13)$$

$$-2 \sum_{\mathbf{l}'\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'\mathbf{t}\mathbf{t}'} P_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} P_{\mathbf{t}\mathbf{t}'}^{\mathbf{l}\mathbf{m}} \langle \mathbf{l}'s' \mathbf{m}\mathbf{t}' | v_C | \mathbf{l}\mathbf{s}\mathbf{l}'\mathbf{t} \rangle,$$

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

Неэмпирический трехчастичный короткодействующий потенциал отталкивания.

В [25] энергия E_{sr} рассчитывалась в прямом пространстве со следующими приближениями: 1) атомные орбитали на разных узлах ортогонализированы с точностью до S^2 включительно; 2) отличным от нуля считается только самый большой интеграл перекрытия $S_\sigma = S_{np_z}^{\mathbf{l}} S_{np_z}^{\mathbf{l}'}$ ($n = 2, 3, 4, 5$); 3) из всех многоцентровых матричных элементов выделялись двухцентровые и парное взаимодействия между атомами; 4) всюду применено приближение ближайших соседей.

Выходом за рамки приближений 1 и 3 является использование точной ортогонализации по Левдину в W_2 (12) и учет трехчастичного взаимодействия W_3 (13).

В работе [19] потенциал короткодействующего отталкивания $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$ для Ne рассчитывается из первых принципов в приближении Хартри-Фока и в базе точно ортогонализированных атомных орбиталей с помощью кластерного разложения (cluster expansion – CE) Абаренкова-Антоновой, впервые предложенного для расчета матрицы электронной плотности в ионных кристаллах [26]. Низжайший порядок кластерного разложения – приближение двухчастичных кластеров, выборочно учитывает слагаемые всех порядков по S , поскольку содержит матрицу \mathbf{P} (7).

В расчетах были использованы таблицы атомных орбиталей Клименти-Розетти [27]. Для кристалла Ag достаточно провести ортогонализацию атомных орбиталей в приближении S^2 [19].

Зависимость $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$ (10), (12) от межатомного расстояния в кристалле интерполируется методом наименьших квадратов в виде удобного выражения (погрешность составляет 1%).

$$V_{sr} = E^{(0)} + W_2 = V_{sr}(y) = (A_4 y^4 + A_3 y^3 + A_2 y^2 + A_1 y + A_0) \exp(-\alpha y), \quad (14)$$

где $y = r/r_0 - 1$, $r_0 = a\sqrt{2}$ – расстояние между ближайшими соседями в несжатом кристалле.

Энергия притяжения между двумя атомами рассчитана в [25] и представлена в виде

$$V_{lr}(y) = -\frac{C}{r^6} [1 + f(y)], \quad f(y) = A \exp(-\beta y), \quad (15)$$

где C – константа Ван-дер-Ваальса, $f(y)$ – функция, обусловленная перекрытием электронных оболочек атомов. Результаты расчетов приведены в Таблице 1 [28].

Двухцентровые кулоновские интегралы, входящие в W_3 (13), также были рассчитаны точно на основе таблиц [27]. 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 (13) можно привести к виду [24]

$$W_3 = -\sum_{ll''} \left(S(r^{ll''}) \right)^2 f(r_1),$$

$$f(r_1) = \frac{S(r_1)}{r_1}, \quad r_1 = \left| \mathbf{r}^{l'} - \frac{1}{2} \mathbf{r}^{ll''} \right|, \quad (16)$$

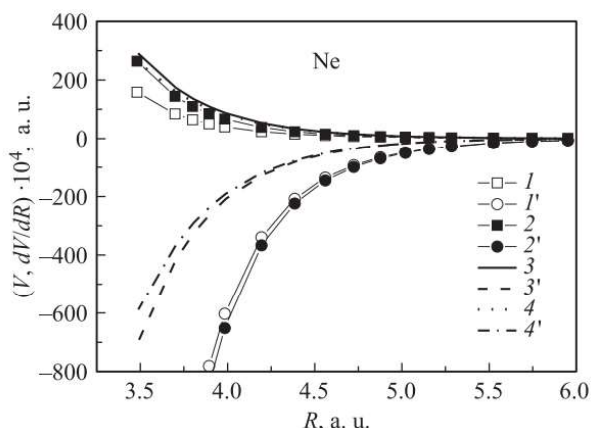


Рис. 1. Межатомные короткодействующие потенциалы и их производные для Ne. 1 – неэмпирический парный короткодействующий потенциал $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$, рассчитанный в модели М4 [19]; 1' – его первая производная по расстоянию; 2 – неэмпирический суммарный потенциал $V_{sr} = E^{(0)} + W_2 + W_3$ с учетом трехчастичного взаимодействия; 2' – его первая производная по расстоянию; 3 – короткодействующая часть парного эмпирического потенциала Азиза-Слэймана U_p [29]; 3' – его первая производная по расстоянию; 4 – эмпирический суммарный потенциал, включающий в себя короткодействующие части парного потенциала Азиза-Слэймана и трехчастичного потенциала Слетера-Кирквуда [11,29,30] $U = U_p - U_{lr} = U_p - A \exp[-\alpha_{lr} (3a\sqrt{2})] \times (1 + 3 \cos^3(\pi/3))$; 4' – первая производная суммарного потенциала по расстоянию.

где $S = S_{np_2 np_2}^{ll''}$ – 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 $(\mathbf{r}^{ll''} \cdot \mathbf{r}^{ll''})$.

Как показано на рис.1, наши короткодействующие потенциалы (двухчастичный $V_{sr}(S^2) = E^{(0)} + W_2$ и трехчастичный $V_{sr}(S^3) = E^{(0)} + W_2 + W_3$) хорошо согласуются с соответствующими лучшими эмпирическими потенциалами [11,29,30] в широкой области сжатия. Однако мы видим, что их первые производные значительно отличаются, начиная с давления $p \approx 30$ GPa.

Расчет и обсуждение уравнений состояний кристаллов инертных газов. В общем случае при конечной температуре T уравнение состояния (3) можно представить в виде

$$p(T, V) = p_{stat}(V) + p_e^*(T, V) + p^*(T, V) + p_{zp}(V) + p_{na}(T, V). \quad (17)$$

Давление p_{stat} есть давление, создаваемое в покоящейся решетке,

$$p_{stat} = p_{sr} + p_{lr},$$

где p_{sr} и p_{lr} – соответствующие производные (с обратным знаком) по объему от короткодействия V_{sr} и дального действия V_{lr} . Давление p_e^* газа электронов проводимости мало в силу малости T по сравнению с фундаментальной щелью. Также мало термическое давление фононов $p^* \sim (T/\theta)^2$ ($\theta = \theta(p)$ – температура Дебая). Отношение (T/θ) всегда мало при больших давлениях, так как θ резко растет с ростом давления. По этой же причине малы вклады электрон-фононного и ангармонического взаимодействий, входящих в неадиабатическую часть давления p_{na} .

Таким образом, остаются не зависящие от T вклады нулевых колебаний от гармонической p_{zp} и ангармонической p_{na} ($T=0$) частей энергии. Из определения следует [20]

$$p_{zp} = -\frac{\partial}{\partial \Omega} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \hbar \omega_{\mathbf{q}\lambda} = \frac{\hbar}{2\Omega N} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \omega_{\mathbf{q}\lambda} \gamma_{\mathbf{q}\lambda},$$

где $\omega_{\mathbf{q}\lambda}$ и $\gamma_{\mathbf{q}\lambda}$ – частота и микроскопический параметр Грюнайзера фонона с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ . Как показывают оценки (см. приближенную формулу для γ в [31]), параметр Грюнайзера мал (по сравнению с масштабами изменения давления) и меняется с объемом, как логарифм. Фононные частоты меняются сильнее, чем $\gamma_{\mathbf{q}\lambda}$, но слабее, чем по линейному закону [20].

Поэтому давление нулевых колебаний незначительно по сравнению с p_{stat} , и его относительный вклад уменьшается с ростом сжатия. Например, в [17] вклад нулевых колебаний в Ne при 6 GPa и 600 GPa составляют 10% и 1%, соответственно. Это также хорошо заметно по сближению изотерм с ростом давления,

наблюдаемому экспериментально во многих материалах (см., например, [31]).

Аналогичное поведение имеет давление $p_{на}$ ($T=0$), но оно еще меньше за счет наличия фоновых частот в знаменателях интегралов [20].

Окончательно можно заключить, что при больших сжатиях определяющий вклад вносит статическая решетка при $T=0$. Для кубического кристалла энергия связи с учетом вторых соседей и трехчастичного короткодействующего отталкивания примет вид

$$E_{coh} = 6E_{sr}(a\sqrt{2}) + 3E_{sr}(2a) + W_3(a) - \frac{1}{2a^4} \left[F_6(0,0)C + \frac{1}{a^2} F_8(0,0)C' + \frac{1}{a^4} F_{10}(0,0)C'' \right], \quad (18)$$

где $E_{sr} = E^{(0)} + W_2$; $F_n(0,0)$ представляют решеточные суммы от $1/r^n$ ($n=6, 8, 10$) и равны соответственно 1,80674; 0,80001 и 0,38472 [22].

Тогда EOS определяется выражением:

$$p = -\frac{\partial E}{\partial \Omega} = -\frac{e^2}{2a^4} \left[\frac{H(a) + \delta H - 2R_t + 0.30112B +}{+0.13335B' + 0.06412B''} \right], \quad (19)$$

где $R_t = -\frac{a}{6e^2} \frac{dW_3(a)}{da}$; $W_3(a) = -24S^2(a\sqrt{2})f\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a\right)$;

$$B = \frac{6C}{a^5 e^2}; \quad B' = \frac{8C'}{a^7 e^2}; \quad B'' = \frac{10C''}{a^9 e^2}.$$

$$\delta H = -\frac{16a^3}{e^2} S(r_0) \begin{bmatrix} 2S_2(r_0)f(r_1) + 3S(r_0)f_2(r_1) - \\ -2S_1(r_0)f_1(r_1) \end{bmatrix}.$$

S_i , f_i выражаются через первые и вторые производные от интеграла перекрытия $S(r^{II})$ по модулю аргумента [32,33].

В модели M2 считается $C \rightarrow C[1+f(y)]$ согласно (15)

$$H(a) = \frac{2a^2}{e^2} \frac{dV_{sr}}{dr} - AB \frac{6+\beta y}{24} \exp[-\beta(y-1)].$$

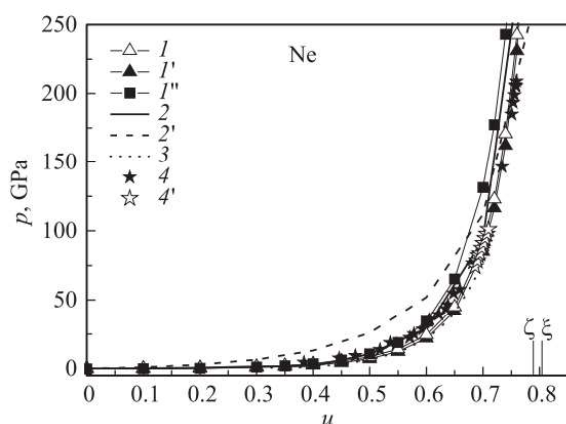


Рис. 2. Уравнения состояния для кристаллического Ne. 1 – расчет EOS в модели M4 на основе парного потенциала; 1' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M4; 1'' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M2; 2 и 2' – эмпирический

расчет EOS Винета [7] и Поириера [34] соответственно; 3 – *ab initio* расчет EOS с помощью DFT-LDA [15]; 4 – эксперимент [4]; 4' – эксперимент [3]. Вертикальными линиями обозначены расчетные величины сжатия металлизации: ζ – расчет [35] (соответствующее давление $p_m = 540$ GPa), ξ – расчет [36] (соответствующее давление $p_m \approx 1$ ТПа).

В работе [19] для неона даны параметры двухчастичного взаимодействия в зависимости от сжатия, рассчитанные с учетом точной ортогонализации атомных орбиталей (модель M4) и во втором порядке по S (модель M2) [37]. Показано, что до сжатий $u \approx 0.3$ величина H примерно одинакова в обеих моделях, при $u \approx 0.7$ величина $H(CE)$, рассчитанная в M4, меньше $H(S^2)$ на $\sim 30\%$.

Для Ne и Ar были выполнены расчеты изотерм при больших сжатиях в работе [19] с парным неэмпирическим короткодействующим потенциалом.

На рис.2–3 приведены уравнения состояния кристаллов Ne и Ar, рассчитанные по формуле (19), экспериментальные значения [3,4,38–44] и результаты расчетов других авторов [7,15,34]. Для сравнения мы привели результаты расчетов работы [19]. Для обоих кристаллов при небольших сжатиях $u \leq 0.45$ результаты наших расчетов EOS во всех моделях и расчеты других авторов совпадают с экспериментом.

Как видно из рис.2 [35,36], для сжатия $0.45 \leq u \leq 0.65$ результаты расчетов EOS в модели M2 с короткодействующим потенциалом $V_{sr} = E^{(0)} + W_2(S^2) + W_3(S^3)$ лежат выше

экспериментальных данных, и с ростом давления погрешность увеличивается. Для того же интервала сжатий результаты расчетов EOS в модели M4 с потенциалом $V_{sr} = E^{(0)} + W_2(CE) + W_3(S^3)$ ($W_2(CE)$ учитывает точную ортогонализацию волновой функции по формуле (12) с помощью кластерного разложения Абаренкова-Антоновой [26]), идут несколько ниже эксперимента и вклад трехчастичного взаимодействия почти незаметен. При сжатии $u \geq 0.65$ лучше всего согласуется с экспериментом настоящие расчеты EOS в модели M4 с учетом вклада трехчастичного взаимодействия.

В Ar (рис.3) [45] EOS лучше всего описывается в самой простой модели M1 ($A = \beta = 0$, учет только первых соседей) на основе парного $V_{sr}(S^2) = E^{(0)} + W_2$ или трехчастичного $V_{sr}(S^3) = E^{(0)} + W_2 + W_3$ короткодействующих потенциалов отталкивания. Эти результаты близки между собой, но в интервале сжатий $0.45 \leq u \leq 0.65$ расчет с парным потенциалом ложиться немного ниже экспериментальных значений, а учет вклада

трехчастичного взаимодействия улучшает согласие с экспериментом. При $u \geq 0.6$ расчеты EOS на основе парного V_{sr} немного лучше согласуется с экспериментом.

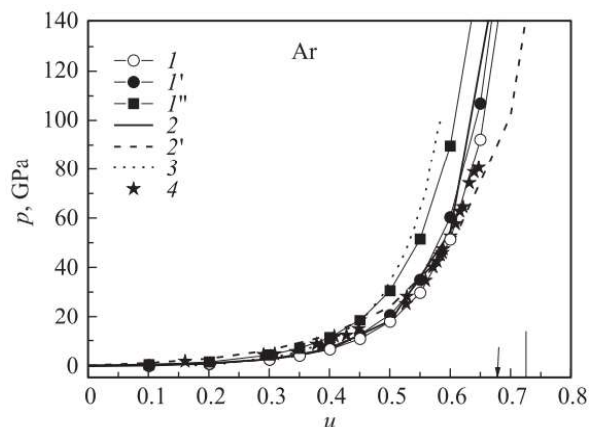


Рис. 3. Уравнения состояния для кристаллического Ar. 1 – расчет EOS в модели M1 на основе парного потенциала; 1' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M1; 1'' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M2; 2, 2' и 3 – то же, что на рис. 2; 4 – эксперимент [38]. Стрелкой обозначена расчетная величина сжатия структурного ГЦК-ГПУ перехода [45] ($p = 220$ GPa). Вертикальной линией обозначена расчетная величина сжатия металлизации [45] ($p_m = 510$ GPa).

Выводы. Наилучшее согласие с имеющимся экспериментом демонстрирует уравнение состояния Винета [7] для Ne до сжатий $u \leq 0.7$, для Ar – до $u \leq 0.6$. При более сильном сжатии наблюдается заметное отклонение (завышение) от эксперимента. Чтобы улучшить согласие теории и эксперимента при больших сжатиях, авторы [34] предлагают новое уравнение состояния, основанное на EOS Бирча-Мурнагана [6]. Уравнение состояния в работе [34] выводится с использованием логарифмического напряжения Генки и, по мнению авторов, должно быть эквивалентно EOS типа Винета [7] при малых деформациях, но вести себя лучше при больших. Как видно из рис. 2 и 3, можно согласиться с этим в случае Ar, но не в случае Ne.

Учет трехчастичного взаимодействия в EOS Ne визуально трудно классифицировать, поэтому мы рассчитали относительную погрешность для 14 экспериментальных точек в различных моделях. Как оказалось, для сжатий $0.518 \leq u \leq 0.606$ наилучшие результаты (погрешность 2,6%) получаются при расчете EOS с использованием парного потенциала и точно ортогонализированных волновых функций ($W_2(CE)$) с учетом вторых соседей и трехчастичного взаимодействия. Для сжатий $0.698 \leq u \leq 0.758$ также нужен парный потенциал $W_2(CE)$, трехчастичное взаимодействие и достаточно первых соседей (погрешность 5,8%). Фактически это означает, что наши результаты в том и другом случаях ложатся в пределах погрешности эксперимента.

Литература

1. Hemley R.J. and Ashcroft H.K. The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // Phys. Today. 1998. V. 51, P. 26.
2. Finger L.W., Hazen R.M., Zou G., Mao H.K., Bell P.M. Structure and compression of crystalline argon and neon at high pressure and room temperature // Appl. Phys. Lett. 1981. V. 39, P. 892.
3. Hemley R.J., Zha C.S., Jephcoat A.P., Mao H.K., Finger L.W., Cox D.E. X-ray diffraction and equation of state of solid neon to 110 GPa // Phys. Rev. B. 1989. V. 39, P. 11820.
4. Dewaele A., Datchi F., Loubeyre P., Mezouar M. High pressure – high temperature equations of state of neon and diamond // Phys. Rev. B. 2008. V. 77, P. 094106.
5. Takemyra K., Watanuki T., Ohwada K., Machida A., Ohmura A., Aoki K. Powder x-ray diffraction study of Ne up to 240 GPa // J. Phys.: Conference Series. 2010. V. 215, P. 012017.
6. Birch F. Elasticity and constitution of the Earth's interior // J. Geophys. Res. 1952. V. 57, P. 227.
7. Vinet P., Rose J.H., Ferrante J., Smith L.R. Universal features of the equation of state of solids // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1, P. 1941.
8. Kumar M. High pressure equation of state for solids // Physica B. 1995. V. 212, P. 391.
9. Fang Z.H. Extension of the universal equation of state for solids in high-pressure phases // Phys. Rev. B. 1998. V. 58, P. 20.
10. Gaurav S., Sharmu B.S., Sharma S.B., Upadhyaya S.C. Analysis of equations of state for solids under high compressions // Physica B. 2002. V. 322, P. 328.
11. Freiman Yu.A., Tretyak S.M. Many-body interactions and high-pressure equations of state in rare-gas crystals // Low Temp. Phys. 2007. V. 33, P. 719.
12. Gupta S., Goyal S.C. Seismic wave velocities of rare gas solids through elastic properties in Earth's lower mantle // Sci. China Ser D-Earth Sci. 2009. V. 52, P. 1599.
13. Bonnet P. Equation of state for solid rare gases and alkali metals under pressure // Physica B. 2016 V. 492, P. 50.
14. Loubeyre P. Three-body exchange interaction in dense rare gases // Phys. Rev. B. 1988. V. 37, P. 5432.
15. Tsuchiya T., Kawamura K. First-principles study of systematics of high-pressure elasticity in rare gas solids, Ne, Ar, Kr, and Xe // J. Chem. Phys. 2002. V. 117, P. 5859.
16. Drummond N.D., Needs R.J. Quantum Monte Carlo, density functional theory, and pair potential studies of solid neon // Phys. Rev. B. 2006. V. 73, P. 024107.
17. Schwerdtfeger P., Hermann A. Equation of state for solid neon from quantum theory // Phys. Rev. B. 2009. V. 80, P. 064106.
18. He Y., Tang X., Pu Y. First-principle study of solid neon under high compression // Physica B. 2010. V. 405, P. 4335.
19. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Уравнение состояния кристаллов инертных газов вблизи металлизации // ФТТ. 2001. Т. 43, С. 1292.
20. Bar'akhtar V.G., Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. Theory of adiabatic potential and atomic properties of simple metals. Gordon&Breach, London (1999). 317 p.
21. Голыго К.Б., Троицкая Е.П. Распространение динамической теории кристаллических решеток с деформированными атомами на кристаллы элементов нулевой группы // ФТТ. 1971. Т. 13, С. 1135.

22. Болонин О.Н., Толпыго К.Б. Квадрупольная деформация атомов в динамике решетки твердых благородных газов // ФТТ. 1973. Т. 15, С. 1674.
23. Абаренков И.В., Антонова И.М., Барьяхтар В.Г., Булатов В.Л., Зароченцев Е.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов. Наука. думка, Киев (1991). 450 с.
24. Троицкая Е.П., Чабаненко Вал.В., Жихарев И.В., Горбенко Е.Е. Ab initio теория многочастичного взаимодействия и соотношения Коши в сжатых кристаллах инертных газов // ФТТ. 2011. Т. 53, С. 1555.
25. Дорман В.Л., Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Энергия связи и межатомный потенциал кристаллов инертных газов. // ФТТ. 1981. Т. 23, С. 1581.
26. Абаренков И.В., Антонова И.М., Барьяхтар В.Г., Булатов В.Л., Зароченцев Е.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов – Киев: Наукова думка, 1991 – 450 с.
27. Clementi F., Roetti C. Roothan-Hartree-Fock atomic wave functions // At. Data Nucl. Data Table. 1974. V. 14, P. 177.
28. Пилипенко Е.А., Троицкая Е.П., Горбенко Е.Е. Ab initio теория уравнения состояния сжатых кристаллов инертных газов // ФТТ. 2018. Т. 60, С. 151.
29. Aziz R.A., Slaman M.J. The Ne-Ne interatomic potential revisite // Chem. Phys. 1989. V. 130, P. 187.
30. Silvera I.F., Goldman V.V. The isotropic intermolecular potential for H₂ and D₂ in the solid and gas phases // J. Chem. Phys. 1978. V. 69, P. 4209.
31. Taravillo M., Baonza V.G., Nunez J., Caceres M. Simple equation of state for solids under compression // Phys. Rev. B. 1996. V. 54, P. 7034.
32. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A. Ab initio theory of the many-body interaction and elastic properties of rare-gas crystals under pressure // Phys. Status Solidi B. 2014. V. 251, P. 774.
33. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Chabanenko Val.V. Adiabatic potential and elastic properties of compressed rare-gas crystals in the model of deformable atoms // Phys. Status Solidi B. 2015. V. 252, P. 709.
34. Poirier J.P., Tarantola A. A logarithmic equation of state // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 1998. V. 109, P. 1.
35. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Природа запрещенной щели и переход изолятор-металл под давлением // ФТТ. 2002. Т. 44, С. 1309.
36. March N.H. In: Advances in high pressure research. V.3 / Ed. R.S. Bradley. Academic Press, N.Y. (1969). P.241.
37. Толпыго К.Б., Троицкая Е.П. Короткодействующие силы в кристаллах элементов нулевой группы // ФТТ. 1975. Т. 17, С. 102.
38. Ross M., Mao H.K., Bell P.M., Xu J.A. The equation of state of dense argon: A comparison of shock and static studies // J. Chem. Phys. 1986. V. 85, P. 1028.
39. Jephcoat A.P. Rare-gas solids in the Earth's deep interior // Nature 1998. V. 393, P. 355.
40. Aleksandrov I.V., Zisman A.N., Stishov S.M. An investigation of the equations of state of the isoelectronic substances CsI-Xe and RbBr-Kr. Phase transitions in CsI and RbI // Sov. Phys. JETP 1987. V. 65, P. 371.
41. Zisman A.N., Aleksandrov I.V., Stishov S.M. X-ray study of equations of state of solid xenon and cesium iodide at pressures up to 55 GPa // Phys. Rev. B. 1985. V. 32, P. 484.
42. Jephcoat A.P., Mao H.-k., Finger L.W., Cox D.E., Hemley R.J., Zha C.-s. Pressure-induced structural phase transitions in solid xenon // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59, P. 2670.
43. Reichlin R., Brister K.E., McMahan A.K., Ross M., Martin S., Vohra Y.K., Ruoff A.L. Evidence for the insulator-metal transition in xenon from optical, x-ray, and band-structure studies to 170 GPa // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62, P. 669.
44. Errandonea D., Schwager B., Boehler R., Ross M. Phase behavior of krypton and xenon to 50 GPa // Phys. Rev. B. 2002. V. 65, P. 214110.
45. Kwon I., Collins L.A., Kress J.D., Troullier N. First-principles study of solid Ar and Kr under high compression // Phys. Rev. B. 1995. V. 52, P. 165.

References

- Hemley R.J. and Ashcroft H.K. The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // Phys. Today. 1998. V. 51, P. 26.
- Finger L.W., Hazen R.M., Zou G., Mao H.K., Bell P.M. Structure and compression of crystalline argon and neon at high pressure and room temperature // Appl. Phys. Lett. 1981. V. 39, P. 892.
- Hemley R.J., Zha C.S., Jephcoat A.P., Mao H.K., Finger L.W., Cox D.E. X-ray diffraction and equation of state of solid neon to 110 GPa // Phys. Rev. B. 1989. V. 39, P. 11820.
- Dewaele A., Datchi F., Loubeyre P., Mezouar M. High pressure – high temperature equations of state of neon and diamond // Phys. Rev. B. 2008. V. 77, P. 094106.
- Takemyra K., Watanuki T., Ohwada K., Machida A., Ohmura A., Aoki K. Powder x-ray diffraction study of Ne up to 240 GPa // J. Phys.: Conference Series. 2010. V. 215, P. 012017.
- Birch F. Elasticity and constitution of the Earth's interior // J. Geophys. Res. 1952. V. 57, P. 227.
- Vinet P., Rose J.H., Ferrante J., Smith L.R. Universal features of the equation of state of solids // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1, P. 1941.
- Kumar M. High pressure equation of state for solids // Physica B. 1995. V. 212, P. 391.
- Fang Z.H. Extension of the universal equation of state for solids in high-pressure phases // Phys. Rev. B. 1998. V. 58, P. 20.
- Gaurav S., Sharmu B.S., Sharma S.B., Upadhyaya S.C. Analysis of equations of state for solids under high compressions // Physica B. 2002. V. 322, P. 328.
- Freiman Yu.A., Tretyak S.M. Many-body interactions and high-pressure equations of state in rare-gas crystals // Low Temp. Phys. 2007. V. 33, P. 719.
- Gupta S., Goyal S.C. Seismic wave velocities of rare gas solids through elastic properties in Earth's lower mantle // Sci. China Ser D-Earth Sci. 2009. V. 52, P. 1599.
- Bonnet P. Equation of state for solid rare gases and alkali metals under pressure // Physica B. 2016 V. 492, P. 50.
- Loubeyre P. Three-body exchange interaction in dense rare gases // Phys. Rev. B. 1988. V. 37, P. 5432.

15. Tsuchiya T., Kawamura K. First-principles study of systematic of high-pressure elasticity in rare gas solids, Ne, Ar, Kr, and Xe // *J. Chem. Phys.* 2002. V. 117, P. 5859.
16. Drummond N.D., Needs R.J. Quantum Monte Carlo, density functional theory, and pair potential studies of solid neon // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73, P. 024107.
17. Schwerdtfeger P., Hermann A. Equation of state for solid neon from quantum theory // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 80, P. 064106.
18. He Y., Tang X., Pu Y. First-principle study of solid neon under high compression // *Physica B.* 2010. V. 405, P. 4335.
19. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Уравнение состояния кристаллов инертных газов вблизи металлизации // ФТТ. 2001. Т. 43, С. 1292.
20. Bar'akhtar V.G., Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. Theory of adiabatic potential and atomic properties of simple metals. Gordon&Breach, London (1999). 317 p.
21. Tolpygo K.B., Troitskaya E.P. Extension of dynamical theory of crystal lattices with deformed atoms to crystals of elements in zeroth group // *Sov. Phys. Solid State.* 1971. V. 13, P. 939.
22. Bolonin O.N., Tolpygo K.B. Quadrupole deformation of atoms in the dynamics of a lattice of solid noble gases // *Sov. Phys. Solid State.* 1973. V 15, P. 1124.
23. Abarenkov I.V., Antonova I.M., Baryakhtar V.G., Bulatov V.L., Zarochentsev E.V. Computational physics methods in solid state theory. Electronic structure of perfect and defective crystals. Nauk. Dumka, Kiev (1991). 450 p.
24. Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Zhykharev I.V., Gorbenko Ie.Ie. Ab initio theory of many-body interactions and Cauchy relations in compressed rare-gas crystals // *Phys. Solid State.* 2011. V. 53, P. 1555.
25. Dorman V.L., Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. Binding energy and interatomic potential of inert gas crystals. // *Sov. Phys. Solid State.* 1981. V. 23, P. 1581.
26. Abarenkov I.V., Antonova I.M., Baryakhtar V.G., Bulatov V.L., Zarochentsev E.V. Computational physics methods in solid state theory. Electronic structure of perfect and defective crystals – Kiev: Nauk. Dumka, 1991 – 450 p.
27. Clementi F., Roetti C. Roothan-Hartree-Fock atomic wave functions // *At. Data Nucl. Data Table.* 1974. V. 14, P. 177.
28. Pilipenko E.A., Troitskaya E.P., Gorbenko Ie.Ie. Ab initio theory of the equation of state for compressed rare-gas crystals // *Phys. Solid State.* 2018. V. 60, P. 151.
29. Aziz R.A., Slaman M.J. The Ne-Ne interatomic potential revisite // *Chem. Phys.* 1989. V. 130, P. 187.
30. Silvera I.F., Goldman V.V. The isotropic intermolecular potential for H₂ and D₂ in the solid and gas phases // *J. Chem. Phys.* 1978. V. 69, P. 4209.
31. Taravillo M., Baonza V.G., Nunez J., Caceres M. Simple equation of state for solids under compression // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54, P. 7034.
32. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A. Ab initio theory of the many-body interaction and elastic properties of rare-gas crystals under pressure // *Phys. Status Solidi B.* 2014. V. 251, P. 774.
33. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Chabanenko Val.V. Adiabatic potential and elastic properties of compressed rare-gas crystals in the model of deformable atoms // *Phys. Status Solidi B.* 2015. V. 252, P. 709.
34. Poirier J.P., Tarantola A. A logarithmic equation of state // *Physics of the Earth and Planetary Interiors.* 1998. V. 109, P. 1.
35. Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. The nature of the forbidden gap and the insulator-metal junction under pressure // *Phys. Solid State.* 2002. V. 44, P. 1309.
36. March N.H. In: *Advances in high pressure research. V.3* / Ed. R.S. Bradley. Academic Press, N.Y. (1969). P.241.
37. Tolpygo K.B., Troitskaya E.P. Short-range forces in crystals of group zero elements // *Sov. Phys. Solid State.* 1975. V. 17, P. 102.
38. Ross M., Mao H.K., Bell P.M., Xu J.A. The equation of state of dense argon: A comparison of shock and static studies // *J. Chem. Phys.* 1986. V. 85, P. 1028.
39. Jephcoat A.P. Rare-gas solids in the Earth's deep interior // *Nature* 1998. V. 393, P. 355.
40. Aleksandrov I.V., Zisman A.N., Stishov S.M. An investigation of the equations of state of the isoelectronic substances CsI-Xe and RbBr-Kr. Phase transitions in CsI and RbI // *Sov. Phys. JETP* 1987. V. 65, P. 371.
41. Zisman A.N., Aleksandrov I.V., Stishov S.M. X-ray study of equations of state of solid xenon and cesium iodide at pressures up to 55 GPa // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32, P. 484.
42. Jephcoat A.P., Mao H.-k., Finger L.W., Cox D.E., Hemley R.J., Zha C.-s. Pressure-induced structural phase transitions in solid xenon // *Phys. Rev. Lett.* 1987. V. 59, P. 2670.
43. Reichlin R., Brister K.E., McMahan A.K., Ross M., Martin S., Vohra Y.K., Ruoff A.L. Evidence for the insulator-metal transition in xenon from optical, x-ray, and band-structure studies to 170 GPa // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62, P. 669.
44. Errandonea D., Schwager B., Boehler R., Ross M. Phase behavior of krypton and xenon to 50 GPa // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 65, P. 214110.
45. Kwon I., Collins L.A., Kress J.D., Troullier N. First-principles study of solid Ar and Kr under high compression // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52, P. 165.

**Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Tkacheva A.O.
EQUATION OF STATE Ne AND Ar CRYSTALS
UNDER PRESSURE**

The nonempiric equations of state of compressed neon and argon crystals based on the adiabatic potential are investigated. The paired and three-body short-range repulsive potentials were calculated by the Hartree-Fock method in the basis of localized functions with their exact orthogonalization to each other and do not contain experimentally determined parameters. The theory is compared with experiment and the results of calculations by other authors. An analysis of the proposed equations of state at large compressions showed the importance of taking into account the three-body interaction and terms with higher powers in the overlap integral in compressed neon.

Key words: rare-gas crystals, many-body short-range interaction, deformation of electron shells, equation of state, Hartree-Fock approximation, high pressure.

Горбенко Евгений Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, доцент, директор Института физико-математического образования, информационных и

обслуживающих технологий Луганского государственного педагогического университета.
E-mail: e_g81@mail.ru

Gorbenko Ievgen, PhD in Physics and Mathematics, Docent, Director of the Institute of Physics and Mathematics Education, Information and Service Technologies of Lugansk State Pedagogical University.

Пилипенко Екатерина Александровна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела фазовых превращений Донецкого физико-технического института имени А.А. Галкина.
E-mail: pilipenko.katerina@mail.ru

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

Ткачева Алеся Олеговна, старший лаборант кафедры физики и методики преподавания физики Луганского государственного педагогического университета.

E-mail: destin.ation@yandex.ua

Tkacheva Alesya, Senior Laboratory Assistant of Department of Physics and Methods of Teaching Physics of Lugansk State Pedagogical University.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года