

PACS: 62.50.-p, 64.10.+h, 64.30.+t

Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ КОЛЕБАНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ.
1. МОДЕЛЬ К.Б. ТОЛПЫГО И ФОНОННЫЕ ЧАСТОТЫ
В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
83114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

Статья поступила в редакцию 22 октября 2003 года

В рамках модели К.Б. Толпыго и ее модификаций обсуждаются отдельные электрон-ионные слагаемые энергии кристаллов инертных газов (КИГ). Рассчитываются и сравниваются с экспериментом фононные частоты кристаллов ряда Ne-He при $T = p = 0$. Согласие теории и эксперимента хорошее.

1. Введение

К настоящему времени широкое распространение получили новые методы вычисления фононных (и иных) спектров твердых тел: метод моментов (или цепных дробей) [1], замороженных фононов [2], всевозможные кластерные методы и метод фрагментов (см., напр., [3]), молекулярной динамики и др. (см. обзор [4]). Интерес к фононным методам особенно возрос в последние 2–3 года в связи с развитием техники высоких давлений, поскольку описание сжатого вещества зачастую требует пересмотра основных положений и приближений.

И все-таки, на наш взгляд, прямое последовательное вычисление элементов динамической матрицы наиболее адекватно, поскольку при этом проявляются все приближения, вложенные в модель. Поэтому разработка моделей, пригодных для расчета фононных частот, на сегодня весьма актуальна.

В настоящей работе мы, основываясь главным образом на работах К.Б. Толпыго и наших [5–8], проводили вычисление и сравнение с экспериментом частот при $T = 0$, выходя за адиабатическое приближение. Заметим, что неадиабатические поправки малы при низких давлениях, когда элементарные спектры энергетически отдалены от электронных спектров.

2. Неадиабатические вклады в динамику решетки

В модели К.Б. Толпыго кристалл рассматривается как совокупность N точечных ионов валентности Z (ядро и внутренние электроны) и оболочек, каждая из которых состоит из Z -валентных электронов, взаимодействующих не только с ионами, но и между собой. Таким образом, волновая функция кристалла есть детерминант $N \times N$, состоящий из детерминантов $Z \times Z$. При этом учтены корреляции внутри валентных электронов отдельного атома. Энергия такой системы имеет вид [6]:

$$E = \sum_l \left\{ \frac{1}{2a} (\mathbf{P}^l)^2 + \sum_{l'}^{(12)} \left[\frac{\beta(r_0)}{r_0} (\mathbf{u}^l - \mathbf{u}^{l'}) \mathbf{P}^l + \frac{1}{r_0} \frac{d}{dr} \left(\frac{\beta(r)}{r} \right) (\mathbf{P}^l \mathbf{r}^{ll'}) (\mathbf{u}^l - \mathbf{u}^{l'}) \mathbf{r}^{ll'} \right] + \frac{1}{2} \sum_{l'} \left[\frac{\mathbf{P}^l \mathbf{P}^{l'}}{|\mathbf{r}^{ll'}|^3} - 3 \frac{(\mathbf{P}^l \mathbf{r}^{ll'}) (\mathbf{P}^{l'} \mathbf{r}^{ll'})}{|\mathbf{r}^{ll'}|^5} \right] + E^{(2)} \right\}. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{P}^l – дипольный момент электронной оболочки; $\mathbf{p}^l = e\mathbf{u}^l$ – дипольный момент иона l ;

$$E^{(2)} = \sum_l \left\{ \sum_{l'}^{(12)} \left[\frac{1}{4} f^{ll'} (\mathbf{u}^l - \mathbf{u}^{l'})^2 + \frac{d^{ll'}}{4r_0^2} [(\mathbf{u}^l - \mathbf{u}^{l'}) \mathbf{r}^{ll'}]^2 \right] + \frac{1}{2} \sum_{l'} \left[\frac{3C(\mathbf{u}^l - \mathbf{u}^{l'})^2}{|\mathbf{r}^{ll'}|^8} - \frac{24C[(\mathbf{u}^l - \mathbf{u}^{l'}) \mathbf{r}^{ll'}]^2}{|\mathbf{r}^{ll'}|^{10}} \right] \right\}, \quad (2)$$

где $f^{ll'}$, $d^{ll'}$ – первая и вторая производные потенциала $v(r)$ соответственно; C – константа Ван-дер-Ваальса.

В гамильтониане кристалла выделим короткодействующую часть $H_{ll'}^{к.д.}$; $\langle 0 |$ – волновая функция кристалла в основном состоянии; $\langle i |$ – волновая функция кристалла, в котором один из атомов возбужден.

В частном случае центральных отталкивающих сил

$$f^{ll'} = \frac{1}{r} \frac{d v(r)}{d r} \Big|_{r=r_0}; \quad d^{ll'} = \left(\frac{d^2 v(r)}{d r^2} - \frac{1}{r} \frac{d v(r)}{d r} \right) \Big|_{r=r_0}, \quad (3)$$

где

$$\sum_{l'}^{(12)} v(\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{l'}) = \sum_{l'} \langle 00 | H_{ll'}^{к.д.} | 00 \rangle + \alpha(\beta_l)^2 - 2 \sum_i \frac{1}{\Delta_i} \left(\sum_{l'} \langle 00 | H_{ll'}^{к.д.} | i0 \rangle \right)^2$$

обозначает короткодействующее взаимодействие атома l с окружением; $r_0 = a\sqrt{2}$ – расстояние между ближайшими соседями.

Первое и третье слагаемые в (1) описывают взаимодействие электронных

оболочек между собой, а второе слагаемое – электронно-ионное взаимодействие, т.е. представляет неадиабатические слагаемые в низшем порядке по смещению атома \mathbf{u}^l . Заметим, что такой же порядок величины имеют слагаемые $\mathbf{P}^2\mathbf{p}^2$, но можно показать, что они приводят к незначительному переопределению амплитуды электрон-фононного взаимодействия β :

$$\beta \sim \langle 00 | H_{II}^{к.д.} | 0i \rangle. \quad (4)$$

Из выражения (1) хорошо заметно, что энергия связи включает в себя помимо обычных неадиабатические члены (пропорциональные \mathbf{Pu}). Следовательно, электрон-решеточное взаимодействие в этой модели учитывается членами порядка смещения \mathbf{u} . Как известно [9], такой же порядок по параметру неадиабатичности имеют слагаемые, пропорциональные \mathbf{u}^2 . Однако можно показать, что эти слагаемые приводят только к незначительному переопределению основных параметров теории. Поступая далее по общеизвестным правилам, мы получаем в прямом пространстве систему уравнений для смещений атомов \mathbf{u} и электронных степеней свободы. Таким образом, в этом подходе движение электронов учтено непосредственно.

Однако в более общем подходе к анализу спектров электронно-ионной системы, например с помощью функций Грина для смещений электронов и фононов, легко получить, что функция Грина смещений сама является функцией искомого частот колебаний. Для нахождения последних понадобятся самосогласованные по искомой частоте решения. Следовательно, в динамической матрице появятся слагаемые, зависящие от искомой частоты и представляющие собой также неадиабатические эффекты. Это происходит особо интенсивно в том случае, когда параметр адиабатичности не мал и электронные и фононные спектры имеют общую область существования. Такого типа эффекты были детально рассмотрены в серии работ [10–12]. Анализ подобных эффектов совершенно необходим при исследовании поведения вещества при большом давлении, когда «перепутывание» спектра неизбежно. В данной статье мы ограничимся случаем $p = 0$, и поэтому эффекты неадиабатичности рассчитываться не будут.

Проведенный краткий анализ показывает, что подход К.Б. Толпыго эквивалентен общему подходу (например, с помощью функций Грина) до тех пор, пока в нем учитываются только низшие члены по неадиабатичности. Его преимущество заключается в том, что в нем оперируют не с общими буквенными выражениями – все параметры этого гамильтониана могут быть рассчитаны из первых принципов, по крайней мере в случае сильной связи. Недостатком этого подхода является невозможность продлить его для учета высших степеней по электронно-колебательному взаимодействию.

3. Параметры теории и выражения для фононных частот при $p = 0$

В КИГ отсутствуют и ионная, и валентная связи, основную роль играют

эффекты поляризации электронных оболочек, в частности вызванное ими взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Установленные в [6] в гармоническом приближении уравнения движения КИГ анализировались в [7], где были получены следующие аналитические выражения для квадратов фоновых частот применительно к симметричным направлениям волнового вектора \mathbf{K} :

– направление $[00\xi]$:

$$\Omega_L^2 = 2(H + G)(1 - \cos k_z) - \frac{(2h + 2g)^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}} (1 - \cos k_z)^2 + (F + E)2 \sin^2 k_z + B\chi_{zz}; \quad (5)$$

$$\Omega_L^2 = (G + 2H)(1 - \cos k_z) - \frac{(2h + g)^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}} (1 - \cos k_z)^2 + 2F \sin^2 k_z + B\chi_{xx}, \quad (6)$$

где $\mathbf{k} = a\mathbf{K}$ (a – половина ребра куба), $\xi_i = k_i/\pi$;

– направление $[\xi\xi\xi]$:

$$\Omega_L^2 = (4G + 3H + 2E + 6F) \sin^2 k_z - \frac{(4h + 3g)^2}{A^{-1} - 2\varphi_{xy}} \sin^4 k_z + B(\chi_{xx} + 2\chi_{xy}); \quad (7)$$

$$\Omega_T^2 = (G + 3H + 2E + 6F) \sin^2 k_z - \frac{(3h + g)^2}{A^{-1} - 2\varphi_{xy}} \sin^4 k_z + B(\chi_{xx} - \chi_{xy}); \quad (8)$$

– направление $[\xi\xi 0]$:

$$\Omega_L^2 = (H + 2G + 2E + 4F) \sin^2 k_z + (2H + G)(1 - \cos k_x) + B(\chi_{xx} + \chi_{xy}) - \frac{[(h + 2g) \sin^2 k_x + (g + 2h)(1 - \cos k_x)]^2}{A^{-1} - \varphi_{zz} - \varphi_{xy}}; \quad (9)$$

$$\Omega_{T_1}^2 = (H + 2E + 4F) \sin^2 k_x + (G + 2H)(1 - \cos k_x) + B(\chi_{xx} - \chi_{xy}) - \frac{[h \sin^2 k_x + (g + 2h)(1 - \cos k_x)]^2}{A^{-1} - \varphi_{zz} + \varphi_{xy}}; \quad (10)$$

$$\Omega_{T_2}^2 = (H + 4F) \sin^2 k_x + 2(G + H)(1 - \cos k_x) + B\chi_{zz} - \frac{[h \sin^2 k_x + 2(g + h)(1 - \cos k_x)]^2}{A^{-1} - \varphi_{zz}}. \quad (11)$$

Здесь φ_{ij} и χ_{ij} – решеточные суммы, зависящие от \mathbf{K} и приведенные в [13] и [7] соответственно; A – поляризуемость атома, отнесенная к a^3 и свя-

занная с диэлектрической проницаемостью формулой Клаузиуса–Моссотти; G, H, E, F – силовые параметры короткодействия между первыми и вторыми соседями соответственно, причем H и F представляют собой поперечные коэффициенты упругости; B – константа сил Ван-дер-Ваальса, отнесенная к $(1/6)\epsilon^2 a^5$; g и h – параметры электрон-ионного взаимодействия (обменно-дипольных сил, см. [6–8]).

Следуя работе [7], приведем некоторые оценки для параметров теории B, G, H, E, F, g, h .

Прежде всего установим, где это возможно, знаки параметров B, H, G, F, E, g, h и примерное соотношение между их величинами.

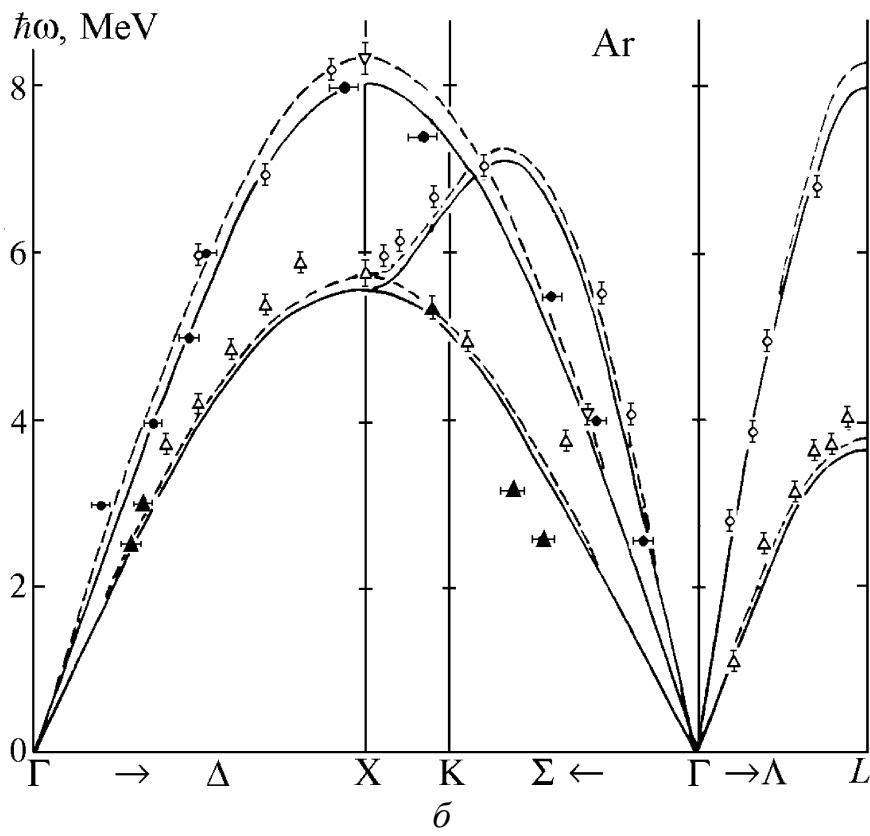
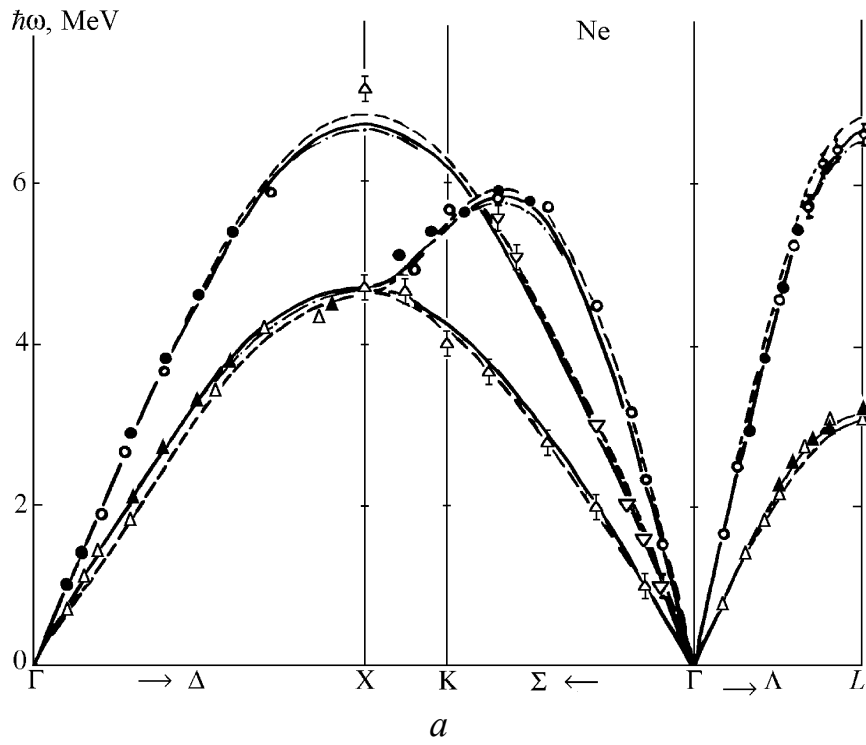
Из значения сил Ван-дер-Ваальса и из соотношения $H + 2F = -0.301123B$ [7,8] следует, что $B > 0$ и $H + 2F < 0$. Кроме того, поскольку H и F определяются короткодействующими силами, но соответствуют первым и вторым соседям, следует ожидать, что $H \gg F$, поэтому $H < 0$.

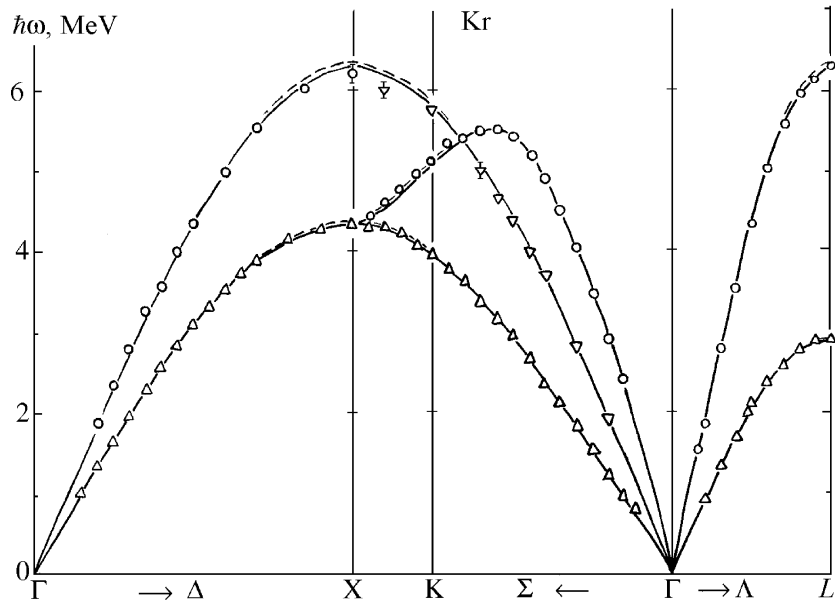
Параметры G и E также одной природы, но определены для первых и вторых соседей, поэтому естественно считать $G \gg E$. С другой стороны, условие положительности частот (5)–(11) и модулей упругости показывает, что G всегда должно быть положительно. Более того, из (5)–(11) видно, что условие $\Omega^2 > 0$ эквивалентно условию $G \geq |H|$ или еще более жесткому $G \gg |H|$. Это вытекает из того, что параметр H пропорционален первой, а G – второй производной от быстро изменяющейся энергии короткодействующих сил $v^{к.д.}(r)$ при $r = a\sqrt{2}$. Знаки F и E установить трудно, однако если учесть, что они выражаются через такие же производные от $v^{к.д.}(r)$, только при $r = 2a$, и предположить, что $v^{к.д.}(r)$ монотонно убывает, то должно быть $F < 0, E > 0$. Для определения знаков параметров g, h заметим, что согласно [6] (см. выражение для энергии (20), содержащее член $\beta^l P^l$) энергия возрастает, если поляризуемость l -го узла увеличивает его перекрытие с соседями. Для этого необходимо, чтобы соблюдалось условие $h > 0$, и так как $\beta^l(r)$ убывает с расстоянием, то $g < 0$, причем $|g| \gg h$. В табл. 1 приведены параметры энергии (1) при $p = 0$, с помощью которых осуществлялись все дальнейшие вычисления [7,8]. Зависимость параметров энергии от давления будет исследована в другой работе.

4. Фононные частоты

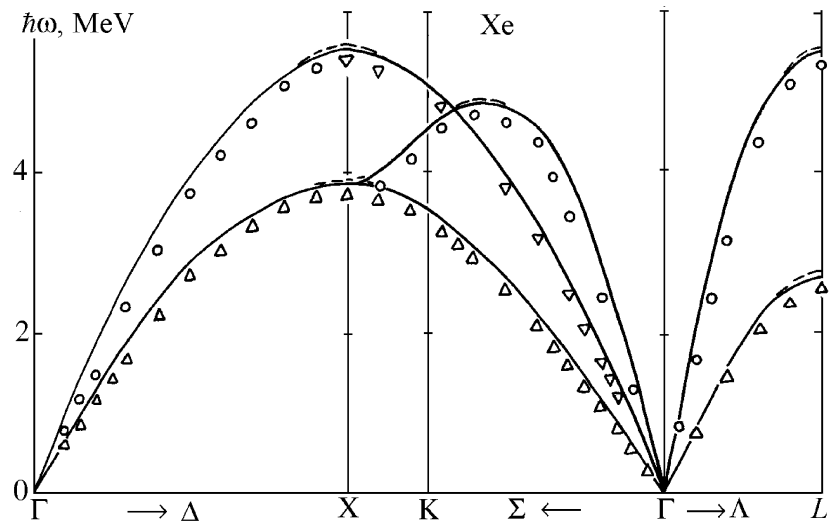
Рассчитаны фононные частоты $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ всего ряда КИГ с параметрами из табл. 1. На рис. приведены $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ кристаллов Ne, Ar, Kr и Xe.

Как видно из рисунка и табл. 2, различие в моделях сказывается в основном на границах зоны Бриллюэна. В случае Ne хорошо заметно





б



з

Рис. Фононные дисперсионные кривые для КИГ. Сплошная, штриховая и пунктирная линии – расчеты соответственно для M3, M2, M4. Экспериментальные данные: *a* – Ne: светлые значки – при 4.7 К [14], темные – 5 К [15]; *б* – Ar: светлые значки – при 4 К [111] и [110] из [16], [100] – из [17], темные – из [18]; *в* – Kr – из [19]; *з* – Xe – из [20]

Таблица 1

Параметры теории для кристаллов Ne, Ar, Kr и Xe в различных моделях

Кристалл	Мо- дель	h	g	H	G	F	E	B
Ne ($T = 4.7$ К, $a = 2.231$ Å)	M1	3.0	-9.0	-1.28	9.7	-0.1	0.2	5.3
	M2	-	-	-1.28	8.8	-0.13	1.00	4.25
	M3	-	-	-1.03	8.84	-	-	4.27
	M4	-	-	-1.15	8.73	-0.13	1.00	4.69
Ar ³⁶ ($T = 4$ К, $a = 2.6555$ Å)	M1	8.0	-24.0	-4.7	46.0	-1.35	4.3	27.5
	M2	-	-	-4.70	38.00	-0.03	0.42	15.61
	M3	-	-	-4.44	36.13	-0.03	0.42	16.12
Kr ($T = 79$ К, $a = 2.86$ Å)	M1	9.5	-28.5	-1.0	70.0	-1.4	4.5	40.0
	M2	-	-	-6.70	55.00	-0.004	0.32	22.25
	M3	-	-	-6.73	55.19	-0.004	0.32	23.41
Xe ($T = 10$ К, $a = 3.063$ Å)	M1	8.3	-26.3	-7.4	73.6	-0.05	0.47	26.00
	M2	-	-	-9.70	82.00	-0.13	0.49	23.21
	M3	-	-	-9.69	81.98	-0.13	0.49	33.16

Примечание. Все величины даны умноженными на 10^2 . В моделях К.Б. Толпыго M1 [7] и M2 [8] не учитываются нулевые колебания в отличие от M3 и M4. Потенциал отталкивания M4 содержит члены всех высших порядков по интегралам перекрытия, M3 – лишь квадратичные.

Таблица 2

Относительный вклад β -нулевых колебаний в частоты на границах зоны Бриллюэна (%)

Кристалл	Направление распространения	β	
		мода T	мода L
Ne	[100]	-2.0	3.0
	[111]	-1.0	5.0
Ar	[100]	1.5	2.2
	[111]	3.6	3.4
Kr	[100]	0.7	1.1
	[111]	0.2	1.2
Xe	[100]	0.6	0.6
	[111]	0.5	0.9

(табл. 2), что учет нулевых колебаний (с потенциалом $v^{к.д.} \sim S^2$ M3) сравнительно сильно повлиял на значения $\omega_\lambda(\mathbf{k})$. Включение же высших порядков по S в $v^{к.д.}$ (M4) лишь слегка переопределило $\omega_\lambda(\mathbf{k})$, рассчитанные в M3. Вышесказанное полностью относится к Ar, Kr и Xe.

Близость теоретических фононных кривых к экспериментальным [14–20]

указывает не только на адекватность моделей, но и на слабость проявления ангармонизмов (нулевых колебаний) в КИГ при $p = 0$. И хотя для Ne B_{11}^{zp} и B_{33}^{zp} [21] вносят вклады в упругие постоянные соответственно 15 и 20%, первая и вторая производные (H и G) потенциала $v^{к.д.}$ и производная B потенциала притяжения при значениях параметров A , β и C , найденных по статическим свойствам, близки к H , G и B , вычисленным по экспериментальным фоновым кривым [22]. Расчеты показывают нечувствительность $\omega_\lambda(\mathbf{k})$ к различиям M2–M4 (см. табл. 1, 2).

5. Обсуждение

Таким образом, в тщательном рассмотрении нуждаются только вклады нулевых колебаний и теплового расширения. Последние были проанализированы в [23]. Обсудим роль нулевых колебаний. Они играют существенную количественную роль в формировании свойств лишь Ne (см. табл. 3). При этом более всего они влияют на энергию связи и упругие постоянные B_{33} и B_{11} . В Ar нулевые колебания не столь значительны, но их вклад в энергию связи и упругую постоянную B_{33} следует учитывать. Свойства Kr и Xe при $T = 0$ почти целиком определяются статической решеткой. Заметим, что относительная малость величины B_{44}^{zp} для всего ряда кристаллов – следствие сильной компенсации положительного вклада четверных ангармонизмов отрицательным вкладом тройных (см. [29]).

Для построения потенциала Ne необходимо рассмотрение парных слагаемых высших степеней по S , в то время как для остальных кристаллов достаточен учет членов $\sim S^2$. Это объясняется тем, что потенциал короткодействия $v^{к.д.}$, состоящий из большого количества как положительных, так и отрицательных слагаемых,

$$v^{к.д.} = v_+^{к.д.} + v_-^{к.д.},$$

для кристаллов Ar, Kr и Xe составляет 40–50% от $v_+^{к.д.}$. В то же время для Ne отношение $v^{к.д.}/v_+^{к.д.}$ составляет 20–25%.

Таким образом, для кристаллов Ar, Kr и Xe слагаемые высших степеней S являются малыми поправками, тогда как для потенциала Ne их вклад сравним с членами $\sim S^2$.

Таблица 3

Энергии связи E_{coh} и нулевых колебаний E^{ZP} (а.е./atom)
и упругие постоянные B_{jk} (10^8 Pa) КИГ при $p = 0$, $T = 0$

Кристалл	E_{coh}	E^{ZP}	B_{11}	B_{44}	B_{33}	Модель
Ne	7.151	2.431	10.731	9.142	4.594	M4
	7.238	2.684	11.44	9.29	5.19	M3
	7.351	–	11.50	9.40	3.16	M2[24]
	7.172	2.071	5.10	6.10	2.50	[25,26]
	–	2.45	–	–	–	[27]
	7.172	–	10.97±0.17	9.29±0.19	3.94±0.19	Эксперимент [15,25]
Ar	29.42	2.860	27.06	21.61	9.91	M3
	29.48	–	29.69	23.67	9.04	M2[24]
	29.48	2.80	23.1	19.9	7.6	[25,26]
	29.48	2.68	22.8	18.4	9.7	[25,26]
	–	2.98	–	–	–	[27]
	29.44	–	26.7	22.8	10.0	Эксперимент [15,25]
Kr	43.47	2.297	33.54	26.53	11.34	M3
	42.48	–	34.14	27.17	10.46	M2[24]
	42.48	2.240	30.1	25.0	9.5	[25,26]
	42.48	2.141	29.9	23.2	12.0	[25,26]
	–	2.31	–	–	–	[27]
	42.63	–	36.1±0.6	26.8±0.3	11.5±0.6	Эксперимент [19,25]
Xe	61.57	2.014	37.33	29.46	12.31	M3
	60.28	–	37.74	29.94	11.71	M2[24]
	61.03	2.001	35.1	28.8	10.85	[25,26]
	61.03	1.916	35.0	26.8	13.6	[25,26]
	–	1.96	–	–	–	[27]
	61.03	–	36.4	29.5	12.2	Эксперимент [28,20]

1. В.И. Пересада, ЖЭТФ **53**, 605 (1967).
2. M.T. Yin, M.L. Cohen, Solid State Commun. **43**, 391 (1982).
3. И.В. Абаренков, И.М. Антонова, В.Г. Барьяхтар, В.Л. Булатов, Е.В. Зароченцев, в

- кн.: Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов, Наукова думка, Киев (1991).
4. *S. Baroni, S. de Gironcoli, A.D. Corso, P. Giannozzi*, Rev. Mod. Phys. **73**, 515 (2001).
 5. *К.Б. Толпыго*, ЖЭТФ **20**, 497 (1950).
 6. *К.Б. Толпыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **13**, 1135 (1971).
 7. *М.А. Белоголовский, К.Б. Толпыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **13**, 2109 (1971).
 8. *Е.П. Троицкая*, Автореф. дисс. ... д-ра физ.-мат. наук, Киев (1987).
 9. *V.G. Bar'akhtar, E.V. Zarochentsev, E.P. Troitskaya*, Theory of adiabatic potential and atomic properties of simple metals, Gordon&Breach, London (1999).
 10. *И.Е. Драгунов, Е.В. Зароченцев, С.М. Орел*, ФММ **67**, 837 (1989).
 11. *И.Е. Драгунов, Е.В. Зароченцев, С.М. Орел*, ФТТ **31**, № 11, 314 (1989).
 12. *И.Е. Драгунов*, Автореф. дисс. ... канд. физ.-мат. наук, Донецк (1992).
 13. *К.Б. Толпыго, И.Г. Заславская*, УФЖ **1**, 226 (1956).
 14. *J.A. Leake, W.B. Daniels, J. Skalyo, Jr., B.C. Frazer, G. Shirane*, Phys. Rev. **181**, 1251 (1969).
 15. *J. Skalyo, Jr., V.J. Minkiewicz, G. Shirane, W.B. Daniels*, Phys. Rev. **B6**, 4766 (1972).
 16. *D.N. Batchelder, M.F. Collins, B.C.G. Haywood, G.R. Sidey*, J. Phys. **C3**, 249 (1970).
 17. *D.N. Batchelder, B.C.G. Haywood, D.H. Saunderson*, J. Phys. **C4**, 910 (1971).
 18. *H. Egger, M. Gsänger, E. Lüscher, B. Dorner*, Phys. Lett. **A28**, 433 (1968).
 19. *J. Skalyo, Jr., Y.I. Endoh, G. Shirane*, Phys. Rev. **B9**, 1797 (1974).
 20. *N.A. Lurie, G. Shirane, J. Skalyo, Jr.*, Phys. Rev. **B9**, 5300 (1974).
 21. *Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко*, ФТВД **12**, ¹ 2, 13 (2002).
 22. *К.Б. Толпыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **14**, 2867 (1972).
 23. *Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко*, ФТВД **12**, № 3, 7 (2002).
 24. *В.Л. Дорман, Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая*, ФНТ **8**, 94 (1982).
 25. *J.W. Leech, J.A. Reissland*, J. Phys. **C3**, 975 (1970).
 26. *Д.А. Рейсленд*, Физика фононов, Мир, Москва (1975).
 27. *G.L. Pollack*, Rev. Mod. Phys. **36**, 748 (1964).
 28. *S.D. Dobbs, G.C. Jones*, Rep. Prog. Phys. **20**, 516 (1957).
 29. *V.G. Vaks, E.V. Zarochentsev, S.P. Kravchuk, V.P. Safronov*, J. Phys. **F8**, 725 (1978).

E.V. Zarochentsev E.P. Troitskaya, V.V. Chabanenko

ELEMENTARY OSCILLATIONS IN THE INERT-GAS CRYSTALS.

1. K.B. TOLPYGO'S MODEL AND PHONON FREQUENCIES
IN THE GROUND STATE

Some electron-ion summands of the energy of inert-gas crystals (IGC) are discussed within the framework of K.B. Tolpygo's model and its modifications. The phonon frequencies of crystals from the Ne–Xe series are calculated for $T = p = 0$ and compared with the experiment. There is a good agreement between theory and experiment.

Fig. The phonon dispersion curves for IGC. Solid, dashed and dotted lines – calculations for M3, M2, M4, respectively. Experimental data: a – Ne: open characters – for 4.7 K [14]; shaded – 5 K [15]; b – Ar: open characters – for 4 K [111] and [110] from [16], [100] – from [17], shaded – from [18]; c – Kr – from [19]; z – Xe – from [20]