

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

Е.П. Троицкая¹, В.В. Чабаненко¹, Е.Е. Горбенко²

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ КОЛЕБАНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ. 2. ФОНОННЫЕ ЧАСТОТЫ СЖАТОГО КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НЕОНА

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

²Луганский национальный педагогический университет им. Т. Шевченко
ул. Оборонная, 2, г. Луганск, 91011, Украина

Статья поступила в редакцию 6 апреля 2004 года

В рамках модели К.Б. Толпыго и с предложенным нами ранее межатомным потенциалом рассчитываются фоновые частоты кристаллического неона при $p \neq 0$, выходя за адиабатическое приближение. Использование концепции управляющих параметров, которыми являются интегралы перекрытия волновых функций электронов атомов в основном и возбужденном состояниях, позволяет приближенно рассчитать вклады электрон-ионного взаимодействия в фоновые частоты при небольших давлениях (сжатиях $\Delta V/V_0 \leq 0.4$). Исследование роли различных взаимодействий показало, что величины фоновых частот, рассчитанные в самой простой модели (с учетом только первых соседей) и самой сложной (первые + вторые соседи + неадиабатические вклады, $V_{sr} \sim S^n$) близки друг к другу. Разница в моделях наиболее заметна на границе зоны Бриллюэна. Вклад высших степеней интеграла перекрытия S в ($V_{sr} \sim S^n$) при $p \neq 0$ в фоновые частоты более значителен, чем при соответствующих расчетах энергии зонной структуры неона.

Введение

В предыдущей работе [1] в рамках модели К.Б. Толпыго и ее модификаций были рассчитаны фоновые частоты кристаллов инертных газов (КИГ) при $T = p = 0$, выходя за адиабатическое приближение. Проведенный анализ неадиабатических вкладов в динамику решетки показал, 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. Недостатком подхода К.Б. Толпыго является невозможность продлить его для учета высших степеней по электронно-колебательному взаимодействию. Преимущество подхода заключается в том, что в нем оперируют не с общими выражениями – все параметры этого гамильтониана могут быть рассчитаны из первых принципов, по крайней мере в случае сильной связи.

Цель настоящей работы – рассчитать в рамках модели К.Б. Толпыго и с предложенным нами ранее межатомным потенциалом [2–5] фононные частоты ω при $p \neq 0$, выходя за адиабатическое приближение.

Во втором подразделе данной работы исследуется зависимость параметров энергии от давления для оценки неадиабатических вкладов в динамику решетки сжатых кристаллов; в третьем – приведены результаты расчетов фононных дисперсионных кривых кристаллического неона как при небольших сжатиях, так и при давлениях вблизи перехода изолятор–металл; в четвертом – обсуждаются полученные результаты, роль 3-частичного взаимодействия.

2. Неадиабатические вклады в динамику решетки при $p \neq 0$

Обычно в динамической теории кристаллических решеток для расчета атомных свойств в гармоническом приближении либо используются модельные потенциалы (с 2–12 параметрами), либо разлагается потенциальная энергия в ряд по смещениям, и параметрами объявляются коэффициенты разложения (1- и 2-я производные потенциальной энергии по смещению). Далее параметры определяются из сравнения теории с экспериментом. Хорошей в этом случае считается теория, в которой параметров мало и для их расчетов не нужно использовать весь набор экспериментальных величин. Остается возможность описать с помощью этих параметров свойства из независимого эксперимента или предсказать еще неизмеренные величины.

В модели К.Б. Толпыго [2] была разработана динамическая теория решеток КИГ, учитывающая деформацию электронных оболочек атомов. «Из первых принципов» получено выражение для потенциальной энергии КИГ как функции смещений атомов из положения равновесия и их дипольных моментов, выведены общие уравнения колебаний кубических гранцентрированных решеток этих кристаллов [1]. Далее вводятся параметры теории: B – безразмерная константа сил Ван-дер-Ваальса; G , H – вторая и первая производные от энергии короткодействия между ближайшими соседями; g и h – параметры электрон-ионного взаимодействия. Для описания взаимодействия между вторыми соседями вводятся дополнительные параметры E , F . Рассчитать их точно не представлялось возможным, поэтому в [6] все они определялись из эксперимента, как в любой феноменологической теории (причем при $p = 0$).

В [3,4] нами был получен адиабатический потенциал КИГ, и для расчетов атомных свойств предложена простая модельная форма

$$E = \frac{1}{2} \sum_R \left\{ V_{sr}(R) - \frac{C}{R} \left[1 - A e^{-\beta(x-1)} \right] \right\}. \quad (1)$$

Параметр Ван-дер-Ваальса C , а также параметры A и β находили из условия минимума энергии, экспериментального значения энергии связи $E_{\text{coh}}^{\text{exp}}$ и малого отклонения сдвигового модуля упругости C_{44} от его экспериментального значения для заданного объема ячейки при $T = p = 0$.

Фактически $V_{sr}(r)$ получено при расчете в парном приближении первого члена из следующего выражения [2,5]:

$$\frac{1}{2} \sum_l \sum_{l'}^{\text{б.с.}} v^{\text{к.д.}}(r^{ll'}) = \frac{1}{2} \sum_l \left\{ \sum_{l'}^{\text{б.с.}} \langle 00 | H_{ll'}^{\text{к.д.}} | 00 \rangle + \alpha \left(\sum_{l'}^{\text{б.с.}} \beta^{ll'} \right)^2 - 2 \sum_i \Delta_i^{-1} \left(\sum_{l'}^{\text{б.с.}} \langle 00 | P_{ll'}^{\text{к.д.}} | i0 \rangle \right)^2 \right\}, \quad (2)$$

здесь α – коэффициент поляризуемости атома; $H_{ll'}^{\text{к.д.}}$ – гамильтониан взаимодействия атомов l и l' за вычетом диполь-дипольных сил; $\sum_{l'}^{\text{б.с.}}$ – суммирование по ближайшим соседям,

$$\beta^{ll'} = \frac{2}{\alpha} \sum_i \Delta_i^{-1} \mathbf{V}_{0i}^l \langle 00 | H_{ll'}^{\text{к.д.}} | i0 \rangle, \quad \mathbf{V}_{0i}^l = \langle 0 | \hat{\mathbf{P}}_l | i \rangle, \quad (3)$$

где Δ_i – энергия возбуждения атома на i -й уровень; $\hat{\mathbf{P}}_l$ – оператор дипольного момента l -го атома.

Матричный элемент от $H_{ll'}^{\text{к.д.}}$ берется для ближайших невозбужденных соседей $\langle 00 | H_{ll'}^{\text{к.д.}} | 00 \rangle$ и между основным состоянием обоих атомов и состоянием, когда один атом возбужден $\langle 00 | H_{ll'}^{\text{к.д.}} | i0 \rangle$.

Короткодействующее отталкивание $V_{sr}(r)$ в (1) намного быстрее, чем два других слагаемых, изменяется (увеличивается) с ростом сжатия и становится определяющим при расчете атомных свойств сжатых кристаллов. Важно поэтому рассчитать $V_{sr}(r)$ как можно точнее. В [7] потенциал $V_{sr}(r)$ получили из первых принципов в приближении Хартри–Фока и в базисе точно ортогонализированных атомных орбиталей, используя кластерное разложение (СЕ) Абаренкова–Антоновой [8]. В [7,9] приведены параметры G, H, E, F , описывающие отталкивание, а также параметр Ван-дер-Ваальса КИГ для сжатий $\Delta V/V_0$ от 0 до 0.8.

Чтобы убедиться в существенной роли эффекта электрон-ионного взаимодействия (т.е. оценить неадиабатические слагаемые в низшем порядке по смещению атома \mathbf{u}^l), следовало бы рассчитать или оценить параметры h, g , входящие в уравнения [2]:

$$\begin{aligned} p_x \Omega^2 = & h P_x [3 - \cos k_x \cos k_y - \cos k_x \cos k_z - \cos k_y \cos k_z] + \\ & + g [P_x (2 - \cos k_x \cos k_y - \cos k_x \cos k_z) + P_y \sin k_x \sin k_y + P_z \sin k_x \sin k_z] + \\ & + H p_x [3 - \cos k_x \cos k_y - \cos k_x \cos k_z - \cos k_y \cos k_z] + \\ & + G [p_x (2 - \cos k_x \cos k_y - \cos k_x \cos k_z) + p_y \sin k_x \sin k_y + p_z \sin k_x \sin k_z] + \\ & + B p_x \sum_l \frac{1 - e^{i\mathbf{k}l}}{|\mathbf{l}|^8} - 8B \sum_l \frac{1 - e^{i\mathbf{k}l}}{|\mathbf{l}|^{10}} (\mathbf{p}l)_x; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} P_x = & h p_x [3 - \cos k_x \cos k_y - \cos k_x \cos k_z - \cos k_y \cos k_z] + \\ & + g [p_x (2 - \cos k_x \cos k_y - \cos k_x \cos k_z) + p_y \sin k_x \sin k_y + \\ & + p_z \sin k_x \sin k_z] - \sum_y \varphi_{xy} P_y = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

а затем рассчитать закон дисперсии для фононов в предположении $h \neq 0$, $g \neq 0$ и $h = 0$, $g = 0$. Однако это требует знания не только функций основного состояния атомов, но и по крайней мере нескольких возбужденных состояний ψ_i . Помимо этого, расчет всех интегралов \mathbf{V}_{ij}^l , $\langle 00 | H_{ij}^{k,d} | ij \rangle$ и т.д. представляет большие технические трудности, поскольку последние нужно повторять для нескольких межатомных состояний, так как результат требует одно- и двукратного их дифференцирования по расстоянию. Поэтому точный расчет *ad initio* g и h в данном случае нецелесообразен. Достаточно провести приближенный расчет, следуя [6] и используя управляющие параметры [9].

Для определения знаков параметров g , h заметим, что согласно формуле (3) и выражению для энергии (1) из [1], содержащему член $\beta^l P^l$, энергия возрастает, если поляризуемость l -го узла увеличивает его перекрытие с соседями. Для этого необходимо, чтобы было $h > 0$, а так как $\beta^l(r)$ убывает с расстоянием, то $g < 0$, причем $|g| \gg h$. По грубой оценке из [2] $g = 1.8 A^{3/2} \sqrt{Ia/e^2}$ (I – потенциал ионизации), для Ne это дает $g \sim 0.024$.

Положим $g = -ch$ и $c \gg 1$. Прежде всего определим c . Рассмотрим уравнение (8) из [1] для $[\xi\xi\xi\xi]$. Если разделить обе части уравнения на $2\sin^2 \pi\xi$ и учесть, что $g = -ch$ и $k_z = \pi\xi$, то оно принимает вид

$$-h^2(3-c)^2 \frac{\sin^2 \pi\xi}{2(A^{-1} + \varphi_{xy})} + 0.5(G + 2E + 3H + 6F) + B \frac{\chi_{xx} - \chi_{xy}}{2\sin^2 \pi\xi} = \frac{\Omega_T^2}{2\sin^2 \pi\xi}. \quad (6)$$

Параметры, фигурирующие в левой части (6), должны быть подобраны таким образом, чтобы правая часть была, по возможности, ближе к экспериментальной. Для примера исследуем кристаллический неон. Экспериментальные значения Ω_T^2 для направления $[\xi\xi\xi\xi]$ можно определить по результатам работы [10] для неона. Коэффициенты при $h^2(3-c)^2$ и B левой части (6) рассчитаны и приведены в табл. П1. Анализ таблицы показывает, что коэффициенты при B и правая часть (6) практически не меняются с изменением ξ , коэффициент при $(G + 2E + 3H + 6F)$ точно равен 0.5, а коэффициент при $h^2(3-c)^2$ очень сильно зависит от ξ . Следовательно, чтобы найденные параметры удовлетворяли уравнениям (6) для различных ξ , необходимо, чтобы $h^2(3-c)^2 \approx 0$, т.е. отличалось от нуля на величину, пропорциональную отклонению величины $\Omega_T^2/2\sin^2 \pi\xi$ от ее среднего значения. Из-за малости коэффициентов при $h^2(3-c)^2$ и малости h^2 нельзя говорить о необходимости

$c = 3$. Для аргона коэффициенты при $h^2(3 - c)^2$ возрастают на порядок, а тенденция колебания $\Omega_T^2 / 2 \sin^2 \pi \xi$ вокруг среднего значения сохраняется. Это позволяет считать $c = 3$ (т.е. $g = -3h$) достаточно хорошим приближением для нахождения параметров как при $p = 0$, так и для $p \neq 0$.

Из построенной теории зонной структуры в [9] был сделан вывод, что зоны изолятора определяются только величинами

$$S_{\alpha\beta}^{\mathbf{lm}} = \langle \mathbf{l}\alpha | \mathbf{m}\beta \rangle, \quad (7)$$

которые являются интегралами перекрытия атомных орбиталей $\varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{l}) = |\mathbf{l}\alpha\rangle$.

Любые воздействия, не меняющие структуры волновых функций электрона в атоме, действуют на кристалл только через изменение расстояния $\mathbf{l} - \mathbf{m}$ и перекрытие атомных орбиталей. В этом смысле величины $S_{\alpha\beta}^{\mathbf{lm}}$ являются единственными управляющими параметрами теории. Из них часто существенны только $S_{\alpha\beta}^{\mathbf{lm}}$ для ближайших соседей (например, в Ne) и только для верхних валентных зон. Таким образом, набор величин $S_{\alpha\beta}^{\mathbf{lm}}$ однозначно определяет все свойства изоляторов – и электронные спектры (через матрицы P и P), и адиабатический потенциал (через матрицу P [8]). Задача о расчете свойств изоляторов разбивается на два этапа: вычисление набора $S_{\alpha\beta}^{\mathbf{lm}}$ и расчет при заданных $S_{\alpha\beta}^{\mathbf{lm}}$ спектров, термодинамики и кинетики.

Для описания неадиабатических вкладов в динамику решетки следует к используемым ранее интегралам перекрытия невозбужденных атомных орбиталей $S_{np_z np_z}^{\mathbf{lm}} \equiv S$ (для Ne $n = 2$) добавить также перекрытие с одной возбужденной орбиталью $|m3s\rangle$:

$$S_{np_z(n+1)s}^{\mathbf{lm}} \equiv \sigma = \langle l2p_z | m3s \rangle. \quad (8)$$

Точные расчеты $V_{sr}(r)$ показали, что $\langle 00 | H^{\text{к.д.}} | 00 \rangle \approx S^2(r)$ является хорошим приближением для нахождения зависимости от расстояния [5,7]. Примем аналогично

$$\langle 00 | H^{\text{к.д.}} | 0i \rangle \approx S\sigma, \quad \langle 00 | H^{\text{к.д.}} | ij \rangle \approx \sigma^2, \quad \beta^{ll'} \sim \sigma^2. \quad (9)$$

На рис. 1 для Ne приведены значения V_{sr} , вычисленные в приближении S^2 (модели M2, M3) и с учетом всего ряда по S (модели M4, M5) в зависимости от сжатия. Видно, что для приближенного расчета производные по r от матричных элементов $\langle 00 | H^{\text{к.д.}} | 00 \rangle$ (параметры H, G) и $\langle 00 | H^{\text{к.д.}} | 0i \rangle$ (параметры h, g) можно считать подобными при всех сжатиях, исключая, возможно,

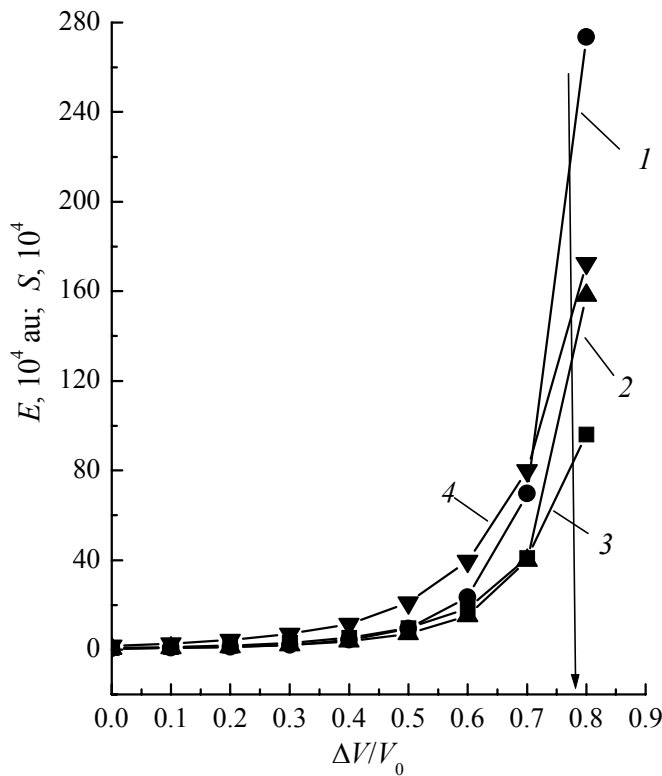


Рис. 1. Потенциал короткодействующего отталкивания V_{sr} и управляющие параметры Ne в зависимости от сжатия $\Delta V/V_0$: 1 – расчет V_{sr} в приближении S^2 ; 2 – расчет V_{sr} с учетом всего ряда по S ; 3 – квадрат интеграла перекрытия электронов атома в основном состоянии S^2 ; 4 – произведение интегралов перекрытия электронов атома в основном и возбужденном состояниях $S\sigma$. Вертикальная линия со стрелкой обозначает точку металлизации

только область вблизи металлизации $\Delta V/V_0 \geq 0.7$. Используя поляризуемость A и параметры g, h , определенные из эксперимента при $p = 0$, а также точно рассчитанные параметры H и G , найдем поляризуемость A и параметры g, h для различных сжатий $\Delta V/V_0$ (табл. П2).

3. Фононные дисперсионные кривые сжатого кристаллического неона

В [1] приведены фононные частоты КИГ с рассчитанными параметрами в различных моделях при $p = 0$. Здесь рассмотрим более подробно Ne, чтобы определить роль вторых соседей, электрон-ионного взаимодействия, а также высших порядков по интегралу перекрытия S в V_{sr} при различных степенях сжатия. На рис. 2 представлены $\hbar\omega_L(\mathbf{k})$ для направления \mathbf{k} [001], определяемые выражением для безразмерной частоты $\Omega^2 = ma^3\omega^2/e^2$ [11]:

$$\Omega_L^2 = 2(H + G)(1 - \cos k_z) - \frac{(2h + 2g)^2}{A^{-1} - \phi_{zz}}(1 - \cos k_z)^2 + (F + E)2 \sin^2 k_z + B\chi_{zz}, \quad (10)$$

где ϕ_{ij} и χ_{ij} – решеточные суммы [11,12]. Остальные параметры описаны в [2]. Параметры G и H рассчитаны с потенциалом (1). Здесь самая простая модель М2 – приближение ближайших соседей ($E = F = 0$) без учета неадиабатических вкладов ($g = h = 0$), V_{sr} в (1) вычислено в приближении S^2 ; М3 – модель М2, в которой добавлены вторые соседи; М4 – приближение ближайших соседей ($E = F = g = h = 0$), но V_{sr} содержит члены всех высших порядков по S

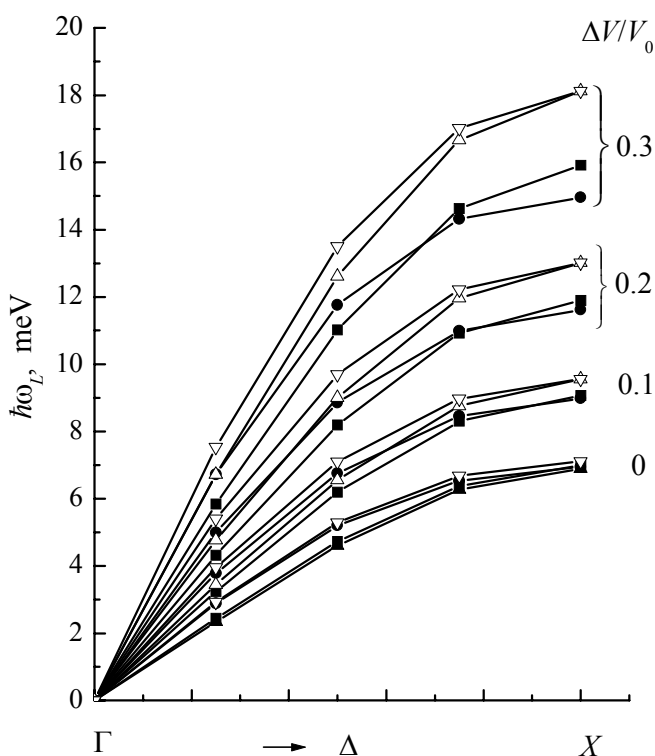


Рис. 2. Продольные частоты ω_L Ne для направления волнового вектора \mathbf{k} [001] при различных сжатиях $\Delta V/V_0$: Δ – расчет в модели M2, ∇ – M3, \blacksquare – M4, \bullet – M5

$(V_{sr} \sim S^n)$; M5 – модель M4, в которой добавлены вторые соседи и неадиабатические слагаемые, $V_{sr} \sim S^n$. Из рис. 2 и выражения (10) видно, что при малых \mathbf{k} существенную роль играют вторые соседи, вклады от которых в точке X отсутствуют. Эффекты неадиабатики и учета всего ряда по S в V_{sr} заметны при всех \mathbf{k} . Пересечение фоновых кривых в моделях M4 и M5 означает, что конкурирующие вклады от вторых соседей и от неадиабатики сравнялись. С ростом сжатия это происходит при все меньших \mathbf{k} .

В табл. ПЗ–5 приведены рассчитанные фоновые частоты Ne в симметричных направлениях \mathbf{k} при различных степенях сжатий $\Delta V/V_0$ (в моделях M2, M3 и M5 соответственно). На рис. 3 схематически изображены фоновые дисперсионные кривые Ne при $\Delta V/V_0 = 0$ и $\Delta V/V_0 = 0.3$ ($p \approx 20$ kbar [7]). Двойные линии при $p = 0$ получаются из-за того, что расчеты в модели К.Б. Толпыго (M1) с параметрами, определенными из эксперимента [6] и вычисленными нами, очень близки, но не всегда совпадают.

Выводы

В настоящей работе представлены результаты расчетов фоновых частот при $p \neq 0$ в гармоническом приближении в различных моделях без учета трехчастичного взаимодействия. В [13] авторы анализировали вклады трехчастичных кластеров в энергию связи, решеточную постоянную, модуль упругости ряда Ne–Xe при $p = 0$. Они пришли к выводу, что хотя двухчастичные вклады доминируют в энергии связи во всех случаях, влияние трехчастичных вкладов не является пренебрежимо малым и для Xe достигает примерно

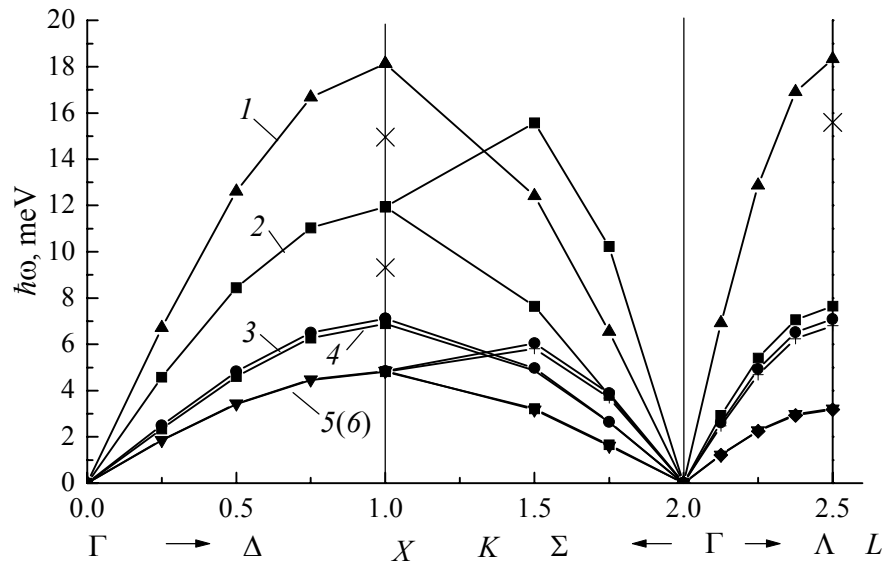


Рис. 3. Фононные дисперсионные кривые для Ne в симметричных направлениях волнового вектора \mathbf{k} : 1, 2 – соответственно продольная и поперечная ветви, рассчитанные в модели M2 при $\Delta V/V_0 = 0.3$; 3, 5 – то же, при $\Delta V/V_0 = 0$; 4, 6 – эксперимент. Для ω_T (линия 4) при $p = 0$ расчет совпадает с экспериментом. \times – значения ω_L и ω_T в точках X и L при $\Delta V/V_0 = 0.3$, рассчитанные в модели M5 (см. табл. П5)

7% энергии связи, а для Ne – всего $\sim 3\%$. В [5] нами был оценен вклад трехчастичного $V_{sr}^{(3)} \sim S^2$ как 0.1 от $V_{sr} \sim S^2$. Анализ, проведенный в [14], показал, что выполнение соотношения Коши для Kг при $p \leq 8$ ГПа подтверждает центральный характер сил в КИГ, а следовательно, и возможность использовать потенциал (1) для описания атомных свойств КИГ при $p \neq 0$.

Первая колонка в табл. П6 показывает, какую погрешность в величины фононных частот вносят параметры, рассчитанные нами, по сравнению с параметрами, определенными из эксперимента (модель M1). Наибольшая погрешность наблюдается при малых \mathbf{k} , что объясняет не совсем удовлетворительное согласие экспериментальных модулей упругости с теорией [14]. Из таблицы также видно, что относительная роль вторых соседей уменьшается с ростом давления.

Отсутствие некоторых значений частот в табл. П6 означает, что при больших сжатиях описывать эффекты неадиабатичности в модели К.Б. Толпыго не корректно (нужно учитывать следующие поправки) либо следует точнее рассчитывать A, g, h .

Нужно отметить, что фононные частоты – очень чувствительная характеристика кристалла (в отличие от макросвойств, являющихся интегральной функцией от ω). Это дало возможность выявить роль членов высших порядков по S в V_{sr} даже при небольших сжатиях более наглядно, чем при расчете зонной структуры Ne [9] (см. величины ω в моделях M4 и M5).

Можно сделать вывод, что ввиду описанной выше компенсации вкладов от эффектов неадиабатики и вторых соседей нет смысла усложнять в даль-

нейшем расчеты, поскольку самая простая модель M2 ближе всего к самой сложной M5.

Расчет фононных частот для других КИГ позволит определить важность различных взаимодействий во всем ряду Ne–Xe. Это будет сделано в следующей работе.

1. *Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко*, ФТВД **13**, № 4, 7 (2003).
2. *К.Б. Толыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **13**, 1135 (1971).
3. *В.Л. Дорман, Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая*, ФНТ **8**, 94 (1982).
4. *В.Л. Дорман, Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая*, ФТТ **23**, 1581 (1981).
5. *К.Б. Толыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **17**, 102 (1975).
6. *К.Б. Толыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **14**, 2867 (1972).
7. *Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая*, ФТТ **43**, 1292 (2001).
8. *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).
9. *В.Г. Барьяхтар, Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, Ю.В. Еремейченкова*, ФТТ **40**, 1464 (1998).
10. *J.A. Leake, W.B. Daniels, J. Skalyo, Jr., B.C. Frazer, G. Shirane*, Phys. Rev. **181**, 1251 (1969).
11. *М.А. Белоголовский, К.Б. Толыго, Е.П. Троицкая*, ФТТ **13**, 2109 (1971).
12. *К.Б. Толыго, И.Г. Заславская*, УФЖ **1**, 226 (1956).
13. *K. Rosciszewski, B. Paulus, P. Fulde, H. Stoll*, Phys. Rev. **B60**, 7905 (1999).
14. *Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко*, ФТТ **46**, 245 (2004).

Приложения

Таблица П1

Зависимость от волнового вектора коэффициентов при параметрах и правой части в уравнении (6)

$\xi_i = k_i / \pi$	Коэффициент при $\hbar^2(3-c)^2$	Коэффициент при B	$\Omega_T^2 / 2 \sin^2 \pi \xi$
0.04	-0.000306	-0.19098	0.02191
0.08	-0.001204	-0.18594	0.01926
0.165	-0.004768	-0.18739	0.02140
0.245	-0.009381	-0.18894	0.01860
0.33	-0.014312	-0.18896	0.01942
0.41	-0.017780	-0.18869	0.01953
0.50	-0.019265	-0.18850	0.01824

Таблица П2

Интегралы перекрытия S , σ (8), поляризуемость A и силовые параметры N_e , вычисленные в модели M5 (безразмерные) в зависимости от сжатия $\Delta V/V_0$

$\Delta V/V_0$	$a, 10^{-8}$ см	$ S_{zz}^{ll'} $	σ	A	G	H	D	E	F	h	g
0.0	2.231	0.812	2.05	3.5211	9.06	-1.32	4.24	1.01	-0.13	3	-8.55
0.1	2.154	1.08	2.55	6.05066	12.59	-1.88	5.06	1.47	-0.20	4.36	-12.40
0.2	2.071	1.35	3.2	10.7210	17.94	-2.74	6.16	2.22	-0.30	6.63	-18.69
0.3	1.981	1.75	4.02	19.3320	26.47	-4.15	7.69	3.54	-0.49	10.62	-29.51
0.4	1.882	2.28	5.03	35.2991	41.00	-6.60	9.94	5.99	-0.83	18.10	-49.22
0.5	1.771	3.1	6.8	77.4182	68.42	-11.22	13.47	10.98	-1.56	33.33	-92.51
0.6	1.644	4.3	9.2	180.7833	128.41	-21.23	19.54	22.45	-3.27	67.93	-171.07
0.7	1.489	6.4	12.5	440.1699	291.26	-48.20	31.57	53.98	-8.17	159.46	-375.65
0.8	1.303	9.8	17.6	1302.36	897.45	-151.83	62.05	172.84	-27.47	466.92	-998.38

Примечание. $A = \alpha/a^3$, a – половина ребра куба, $\alpha = 0.093\sigma^2$; $g = -0.93G$; $h = -2.34H$. Все безразмерные величины даны умноженными на 10^2 .

Таблица ПЗ

Фононные частоты ω (meV) кристаллического Ne в моделях M1 и M2 для симметричных направлений волнового вектора \mathbf{k} в зависимости от сжатия $\Delta V/V_0$

Направление \mathbf{k}	$\Delta V/V_0$	Частота									
		0.0 (M1) $G = 9.7,$ $H = -1.28,$ $D = 5.3$	0.0 (M2) $G = 9.19,$ $H = -1.28,$ $D = 4.24$	0.1 $G = 13.33,$ $H = -1.86,$ $D = 5.06$	0.2 $G = 20.10,$ $H = -2.83,$ $D = 6.16$	0.3 $G = 31.73,$ $H = -4.53,$ $D = 7.69$	0.4 $G = 52.93,$ $H = -7.72,$ $D = 9.94$	0.5 $G = 94.47,$ $H = -14.22,$ $D = 13.47$	0.6 $G = 183.95,$ $H = -28.98,$ $D = 19.54$	0.7 $G = 403.93,$ $H = -68.03,$ $D = 31.57$	0.8 $G = 1073.53,$ $H = -199.20,$ $D = 62.05$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
[001]	$\omega_L (\pi/4)$	2.346	2.501	3.441	4.767	6.716	9.715	14.603	23.204	40.107	80.172
	$\omega_L (\pi/2)$	4.605	4.825	6.557	9.005	12.609	18.160	27.209	43.133	74.430	148.614
	$\omega_L (3\pi/4)$	6.274	6.501	8.760	11.959	16.672	23.934	35.775	56.614	97.569	194.649
	$\omega_L (\pi)$	6.889	7.112	9.556	13.019	18.123	25.897	38.811	61.379	105.734	210.873
	$\omega_T (\pi/4)$	1.851	1.861	2.465	3.320	4.576	6.505	9.632	15.089	25.674	50.282
	$\omega_T (\pi/2)$	3.413	3.433	4.550	6.128	8.450	12.014	17.792	27.873	47.430	92.895
	$\omega_T (3\pi/4)$	4.454	4.481	5.939	8.002	11.035	15.692	23.240	36.411	61.962	121.359
	$\omega_T (\pi)$	4.817	4.847	6.426	8.658	11.942	16.981	25.152	39.407	67.062	131.351

Продолжение табл. ПЗ

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
[110]	$\omega_L(\pi/4)$	3.684	3.883	5.295	7.290	10.228	14.754	22.138	35.145	60.749	121.581
	$\omega_L(\pi/2)$	5.815	6.042	8.161	11.159	15.576	22.381	33.476	53.001	91.375	182.335
	$\omega_T(\pi/4)$	1.657	1.605	2.098	2.789	3.795	5.318	7.737	11.829	19.369	35.370
	$\omega_T(\pi/2)$	3.215	3.170	4.171	5.580	7.643	10.789	15.840	24.531	41.018	77.957
	$\omega_{T_2}(\pi/4)$	3.684	3.883	5.295	7.290	10.228	14.754	22.138	35.145	60.749	121.581
	$\omega_{T_2}(\pi/2)$	5.815	6.042	8.161	11.159	15.576	22.381	33.476	53.001	91.375	182.335
[111]	$\omega_L(\pi/8)$	2.475	2.617	3.574	4.928	6.920	9.990	15.001	23.832	41.232	82.620
	$\omega_L(\pi/4)$	4.688	4.923	6.690	9.190	12.873	18.550	27.815	44.148	76.325	152.867
	$\omega_L(3\pi/8)$	6.242	6.522	8.828	12.095	16.908	24.330	36.444	57.797	99.868	199.944
	$\omega_L(\pi/2)$	6.799	7.092	9.588	13.123	18.334	26.369	39.484	62.602	108.149	216.495
	$\omega_T(\pi/8)$	1.228	1.211	1.594	2.134	2.923	4.127	6.060	9.385	15.694	29.829
	$\omega_T(\pi/4)$	2.276	2.244	2.952	3.948	5.407	7.632	11.204	17.350	29.009	55.132
	$\omega_T(3\pi/8)$	2.973	2.931	3.856	5.158	7.064	9.971	14.638	22.668	37.901	77.031
	$\omega_T(\pi/2)$	3.221	3.175	4.176	5.585	7.649	10.795	15.847	24.539	41.028	77.973

Таблица П4

Фононные частоты ω (meV) кристаллического Ne в моделях М1 и М3 для симметричных направлений волнового вектора \mathbf{k} в зависимости от сжатия $\Delta V/V_0$

Направление \mathbf{k}	$\Delta V/V_0$	Частота									
		0.0 (M1) $G=9.7,$ $H=-1.28,$ $D=5.3,$ $E=0.2,$ $F=-0.1$	0.0 (M3) $G=9.19,$ $H=-1.28,$ $D=4.24,$ $E=1.00,$ $F=-0.13$	0.1 $G=13.33,$ $H=-1.86,$ $D=5.06,$ $E=1.46,$ $F=-0.20$	0.2 $G=20.10,$ $H=-2.83,$ $D=6.16,$ $E=2.21,$ $F=-0.30$	0.3 $G=31.73,$ $H=-4.53,$ $D=7.69,$ $E=3.51,$ $F=-0.48$	0.4 $G=52.93,$ $H=-7.72,$ $D=9.94,$ $E=5.92,$ $F=-0.83$	0.5 $G=94.47,$ $H=-14.22,$ $D=13.47,$ $E=10.85,$ $F=-1.54$	0.6 $G=183.95,$ $H=-28.98,$ $D=19.54,$ $E=22.33,$ $F=-3.24$	0.7 $G=403.93,$ $H=-68.03,$ $D=31.57,$ $E=54.92,$ $F=-8.19$	0.8 $G=1073.53,$ $H=-199.20,$ $D=62.05,$ $E=183.90,$ $F=-28.58$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
[001]	$\omega_L(\pi/4)$	2.403	2.931	3.950	5.398	7.532	10.825	14.812	25.819	45.023	92.273
	$\omega_L(\pi/2)$	4.663	5.287	7.107	9.691	13.500	19.375	26.464	46.010	79.856	162.048
	$\omega_L(3\pi/4)$	6.295	6.678	8.972	12.224	17.017	24.406	33.291	57.735	99.691	199.937
	$\omega_L(\pi)$	6.889	7.112	9.556	13.019	18.128	25.987	35.430	61.379	105.734	210.873
	$\omega_T(\pi/4)$	1.777	1.765	2.231	3.164	4.370	6.213	8.392	14.350	24.204	46.307
	$\omega_T(\pi/2)$	3.334	3.330	4.417	5.962	8.229	11.701	15.811	27.081	45.858	88.665
	$\omega_T(3\pi/4)$	4.423	4.442	5.889	7.939	10.952	15.573	21.052	36.111	61.367	119.767
	$\omega_T(\pi)$	4.817	4.847	6.426	8.658	11.942	16.982	22.960	39.407	67.062	131.351

Продолжение табл. П4

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
[110]	$\omega_L(\pi/4)$	2.521	2.514	3.341	4.524	6.258	8.909	12.051	20.644	34.912	67.106
	$\omega_L(\pi/2)$	4.761	4.818	6.432	8.730	12.108	17.292	23.472	40.419	68.960	134.994
	$\omega_{T_1}(\pi/4)$	1.657	2.136	2.751	3.631	4.918	6.882	9.202	15.697	26.839	54.349
	$\omega_{T_1}(\pi/2)$	3.215	3.745	4.871	6.477	8.831	12.432	16.694	28.544	48.712	97.380
	$\omega_{T_2}(\pi/4)$	3.684	4.131	5.586	7.652	10.696	15.387	21.052	36.628	63.527	128.393
	$\omega_{T_2}(\pi/2)$	5.815	6.363	8.540	11.634	16.192	23.218	31.677	54.973	95.077	191.446
	$\omega_L(\pi/8)$	2.459	2.707	3.678	5.057	7.086	10.213	13.989	24.347	42.186	84.926
	$\omega_L(\pi/4)$	4.659	5.087	6.879	9.426	13.178	18.959	25.935	45.097	78.086	157.122
[111]	$\omega_L(3\pi/8)$	6.206	6.733	9.073	12.401	17.305	24.863	33.977	59.035	102.165	205.496
	$\omega_L(\pi/2)$	6.760	7.319	9.852	13.454	18.762	26.945	36.810	63.941	110.634	222.504
	$\omega_T(\pi/8)$	1.196	1.395	1.815	2.417	3.297	4.640	6.227	10.625	18.053	35.721
	$\omega_T(\pi/4)$	2.216	2.583	3.359	4.471	6.098	8.579	11.511	19.640	33.367	66.017
	$\omega_T(3\pi/8)$	2.895	3.375	4.388	5.841	7.966	11.209	15.040	25.660	43.595	86.254

Таблица П5

**Фононные частоты ω (meV) кристаллического Ne в модели M5
для симметричных направлений волнового вектора \mathbf{k}
в зависимости от сжатия $\Delta V/V_0$**

Направление \mathbf{k}	$\Delta V/V_0$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
	Частота							
[001]	$\omega_L(\pi/4)$	2.8881	3.7778	4.9973	6.7320	9.3235	13.3750	20.5967
	$\omega_L(\pi/2)$	5.1950	6.7559	8.8612	11.7653	15.8261	20.6544	26.7671
	$\omega_L(3\pi/4)$	6.5386	8.4614	10.9954	14.3120	18.3153	18.0480	–
	$\omega_L(\pi)$	6.9518	8.9776	11.6142	14.9544	18.5156	11.8380	–
	$\omega_T(\pi/4)$	1.7155	2.1855	2.8245	3.6924	4.9205	6.6316	8.5603
	$\omega_T(\pi/2)$	3.2336	4.1131	5.2754	6.7617	8.4649	8.5254	–
	$\omega_T(3\pi/4)$	4.3082	5.4701	6.9563	8.6929	9.7958	–	–
	$\omega_T(\pi)$	4.6992	5.9618	7.5527	9.3174	9.7923	–	–
[110]	$\omega_L(\pi/4)$	2.4482	3.1293	4.0598	5.3351	7.0665	12.0506	17.3792
	$\omega_L(\pi/2)$	4.7042	6.0432	7.8378	10.2056	12.9180	–	110.1238
	$\omega_{T_1}(\pi/4)$	2.0907	2.6238	3.3784	4.4569	6.1063	8.8166	13.6186
	$\omega_{T_1}(\pi/2)$	3.6613	4.6257	5.9719	7.8883	10.7977	15.5876	23.9752
	$\omega_{T_2}(\pi/4)$	4.0584	5.3004	6.9726	9.2533	12.3185	14.7033	7.9359
	$\omega_{T_2}(\pi/2)$	6.2387	8.0755	10.5108	13.6930	17.4243	14.7847	–
[111]	$\omega_L(\pi/8)$	2.6594	3.4892	4.6153	6.1941	8.5139	12.0182	18.0481
	$\omega_L(\pi/4)$	4.9908	6.5081	8.5393	11.2961	15.0539	19.0534	22.2515
	$\omega_L(3\pi/8)$	6.5970	8.5582	11.1444	14.5201	18.6422	19.4176	–
	$\omega_L(\pi/2)$	7.1672	9.2803	12.0482	15.5945	19.6653	17.7818	–
	$\omega_T(\pi/8)$	1.3626	1.7186	2.2183	2.9247	–	5.7709	9.0673
	$\omega_T(\pi/4)$	2.5228	3.1807	4.1043	5.4091	–	10.7106	17.0397
	$\omega_T(3\pi/8)$	3.2956	4.1551	5.3616	7.0653	–	14.0638	22.6731
	$\omega_T(\pi/2)$	3.5694	4.4998	5.8058	7.6497	–	15.2662	24.7476

Таблица П6

Относительная роль вкладов различных взаимодействий в фононные частоты (%)

Направление \mathbf{k}	Частота	Δ	δ_0	δ_1	δ_2	δ_3	γ_0	γ_1	γ_2	δ_3
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
	$\omega_L(\pi/4)$	6.6	17.2	14.8	13.24	12.15	15.48	9.79	4.83	0.24
	$\omega_L(\pi/2)$	4.8	9.6	8.4	7.62	7.07	7.67	3.03	1.60	6.69
[001]	$\omega_L(3\pi/4)$	3.6	2.7	2.4	2.22	2.07	0.58	3.41	8.06	14.16
	$\omega_L(\pi)$	3.24	0	0	0	0.03	2.25	6.05	10.79	17.48
	$\omega_T(\pi/4)$	0.5	5.2	9.5	4.70	4.5	2.44	13.34	14.92	19.31
	$\omega_T(\pi/2)$	0.6	3.0	2.9	2.71	2.62	5.81	9.60	13.91	19.98
	$\omega_T(3\pi/4)$	0.6	0.9	0.8	0.79	0.75	3.86	7.90	13.07	21.22
	$\omega_T(\pi)$	0.6	0	0	0	0	3.05	7.22	12.77	21.98
[110]	$\omega_L(\pi/4)$	0.9	5.1	5.0	4.58	4.40	7.58	10.97	14.37	18.50
	$\omega_L(\pi/2)$	1.8	2.9	2.8	2.55	2.43	5.18	8.66	12.51	17.76
	$\omega_T(\pi/4)$	3.1	33.1	31.1	30.19	29.59	30.26	25.06	21.13	17.44
	$\omega_T(\pi/2)$	1.4	18.1	16.8	16.08	15.54	15.50	10.9	7.02	3.21
	$\omega_{T_2}(\pi/4)$	5.4	6.4	5.5	4.97	4.58	4.52	0.1	4.35	9.53
	$\omega_{T_2}(\pi/2)$	3.9	5.3	4.6	4.26	3.95	3.26	1.05	5.81	12.09

Продолжение табл. П6

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
[111]	$\omega_L(\pi/8)$	5.7	3.4	2.9	2.62	2.40	1.62	2.37	6.35	10.49
	$\omega_L(\pi/4)$	5.0	3.3	2.8	2.57	2.37	1.38	2.72	7.08	12.25
	$\omega_L(3\pi/8)$	4.5	3.2	2.8	2.53	2.35	1.15	3.06	7.86	14.12
	$\omega_L(\pi/2)$	4.3	3.2	2.8	2.52	2.33	1.06	3.21	8.19	14.94
	$\omega_T(\pi/8)$	1.4	15.2	13.8	13.26	12.80	12.52	7.82	3.95	0.06
	$\omega_T(\pi/4)$	1.4	15.1	13.8	13.25	12.78	12.42	7.75	3.96	0.04
	$\omega_T(3\pi/8)$	1.4	15.1	13.8	13.24	12.77	12.44	7.76	3.95	0.02
	$\omega_T(\pi/2)$	1.4	15.1	13.8	13.23	12.76	12.42	7.75	3.95	0.01

Примечание. $\delta = \frac{\omega(M2) - \omega(M1)}{\omega(M1)} \cdot 100\%$, $|\delta_i| = \frac{\omega(M2) - \omega(M3)}{\omega(M2)} \cdot 100\%$, $|\gamma_i| = \frac{\omega(M2) - \omega(M5)}{\omega(M2)} \cdot 100\%$, $\delta_i, \gamma_i, i = 0, 1, 2, 3$ со-

ответственно сжатия $\Delta V/V_0 = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3$.

E.P. Troitskaya, V.V. Chabanenko, E.E. Gorbenko

ELEMENTARY OSCILLATIONS IN INERT-GAS CRYSTALS.

2. PHONON FREQUENCIES OF COMPRESSED NEON CRYSTAL

Within the framework of K.B. Tolpygo's model and by using the interatomic potential proposed by us recently, a calculation is made of phonon frequencies of neon crystal for $p \neq 0$ with exceeding the limits of adiabatic approximation. The concept of control parameters such as the overlap integrals for wave functions of electrons of the ground and excited state atoms makes it possible to approximately calculate the contributions of electron-ion interaction to phonon frequencies, in the case of low pressure (compression $\Delta V/V_0 \leq 0.4$). Study of the role of different interactions has shown that values of phonon frequencies calculated by using the simplest model (only nearest neighbours are taken into account) and the most complex one (nearest + next nearest neighbours + nonadiabatic contributions, $V_{sr} \sim S$) are close to each other. Difference in models is the most appreciable at Brillouin zone boundary. For $p \neq 0$ the contribution of highest degrees of the overlap integral S ($V_{sr} \sim S^n$) to phonon frequencies is more considerable than in the case of calculations of neon band structure energy.

Fig. 1. Potential of short-range repulsion V_{sr} and control parameters of Ne depending on compression $\Delta V/V_0$: 1 – calculation of V_{sr} within S^2 approximation; 2 – calculation of V_{sr} with the whole of series in S taken into account; 3 – the square of overlap integral for electrons of atom in the ground state S^2 ; 4 – product of overlap integrals for electrons of the ground and excited state atom $S\sigma$. Vertical line with arrow denotes metallization point

Fig. 2. Longitudinal frequencies ω_L of Ne for wave vector \mathbf{k} direction [001] for different compressions $\Delta V/V_0$: Δ – calculation within M2, ∇ – M3, \blacksquare – M4, \bullet – M5 models

Fig. 3. Phonon dispersion curves for Ne in symmetrical directions of wave vector \mathbf{k} : 1, 2 – respectively longitudinal and transverse branches calculated within the M2-model for $\Delta V/V_0 = 0.3$; 3, 5 – the same for $\Delta V/V_0 = 0$; 4, 6 – experiment. For ω_T (line 4), $p = 0$, calculation coincides with experiment. \times – values of ω_L and ω_T at points X and L , for $\Delta V/V_0 = 0.3$, calculated within the M5-model (see Table 5)