

PACS: 62.50.+p, 62.65.+k, 64.10.+h, 64.70.Kb

Е.П. Троицкая, И.В. Жихарев, Е.А. Пилипенко

УПРУГИЕ СВОЙСТВА СЖАТЫХ КРИСТАЛЛОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ В МОДЕЛИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ АТОМОВ

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

Статья поступила в редакцию 7 мая 2014 года

Упругие свойства сжатых кристаллов инертных газов (КИГ) Ne, Ar, Kr и Xe исследованы в модели деформируемых и поляризуемых атомов. Рассчитаны модули упругости Фукса и коэффициент упругой анизотропии Зенера с учетом многочастичного и квадрупольного взаимодействий в широком интервале давлений. Проведено сравнение с экспериментом и результатами других авторов. В Xe при сжатии 0.6 наблюдается обращение в нуль сдвигового модуля V_{44} , что соответствует ГЦК–ГПУ-переходу при 75 GPa.

Ключевые слова: кристаллы инертных газов, деформация электронных оболочек, квадрупольное взаимодействие, многочастичное взаимодействие, высокое давление, короткодействующее отталкивание, коэффициент упругой анизотропии Зенера

Пружні властивості стислих кристалів інертних газів (КИГ) Ne, Ar, Kr і Xe досліджено в моделі атомів, що можуть деформуватися та поляризуватися. Розраховано модулі пружності Фукса й коефіцієнт пружної анізотропії Зенера з урахуванням багаточасткової та квадрупольної взаємодій у широкому інтервалі тисків. Проведено порівняння з експериментом і результатами інших авторів. У Xe при стисненні 0.6 спостерігається спрямування до нуля зсувного модуля V_{44} , що відповідає ГЦК–ГПУ-переходу при 75 GPa.

Ключові слова: кристали інертних газів, деформація електронних оболонок, квадрупольна взаємодія, багаточасткова взаємодія, високий тиск, короткодійоче відштовхування, коефіцієнт пружної анізотропії Зенера

1. Введение

Теория динамики решетки, развитая К.Б. Толпыго на основе «первых принципов» [1–4], успешно применялась для описания свойств щелочно-галогенидных кристаллов, полупроводников и диэлектриков [5–10] при нулевом давлении.

В серии работ (см. [11–14] и ссылки там) развита неэмпирическая версия модели К.Б. Толпыго для изучения межатомного взаимодействия и динамической теории решеток ГЦК-кристаллов, подвергнутых всестороннему сжа-

тию. В предыдущей работе [14] на основании общей теории, представленной в [12,15], и модели, разработанной в [13], проведено количественное исследование упругих модулей Бирча и соотношения Коши для всего ряда Ne–Xe в широком интервале давлений. Показано, что наблюдаемое отклонение от соотношения Коши $\delta(p)$ для каждого из кристаллов есть результат двух конкурирующих взаимодействий – многочастичного и квадрупольного, проявляющегося в квадрупольной деформации электронных оболочек атомов при смещениях ядер. Представленные *ab initio* рассчитанные зависимости упругих модулей Бирча $B_{ij}(p)$ и $\delta(p)$ хорошо согласуются с экспериментом.

Исследование упругих свойств сжатых КИГ не было бы полным без расчетов упругих модулей типа Фукса B_{ij} и коэффициента упругой анизотропии Зенера A_Z .

Коэффициент Зенера A_Z является наиболее известной мерой упругой анизотропии и применяется для кубического монокристалла. Впервые это понятие было введено в 1947 г. при изучении β -латуни [16]. С течением времени в литературе был описан широкий спектр единиц измерений упругой анизотропии. Авторы наряду с коэффициентом Зенера для кубических кристаллов использовали различные комбинации упругих постоянных для кристаллов с симметрией низшего порядка [17–20].

В 2006 г. Ледбеттер и Миглиори в работе [21] предложили способ вычисления упругой анизотропии, связанный с коэффициентом Зенера, который может быть применен ко всем кристаллическим системам, т.е. не зависимый от симметрии кристалла. Авторы, используя уравнение Кристоффеля, получили выражение для коэффициента анизотропии как отношение максимальной и минимальной скоростей сдвиговых звуковых волн. Для кристаллов с кубической симметрией этот коэффициент равен коэффициенту Зенера.

Недавно был предложен универсальный индекс упругой анизотропии A^U , который определяется через сдвиговые и объемные модули, различным образом усредненные [22]. В случае изотропности материала этот индекс равен нулю.

Настоящая публикация продолжает цикл работ [12–14], посвященных неэмпирическим расчетам упругих свойств Ne, Ar, Kr и Xe в актуальной области давлений – обращения в нуль фундаментальной щели. Расчеты проведены в модели деформируемых и поляризуемых атомов с учетом многочастичного взаимодействия. Исследованы упругие модули типа Фукса B_{ij} и коэффициент упругой анизотропии Зенера A_Z для сжатых кристаллов ряда Ne–Xe. Рассмотрена проблема устойчивости ГЦК-решетки.

2. Упругие свойства сжатых кристаллов

При изучении упругих свойств напряженного кристалла необходимо использовать теорию конечных деформаций [23,24]. При наличии напряжения различают три вида модулей упругости: коэффициенты разложения свободной энергии $C_{ikl\dots}$ (модули типа Браггера), коэффициенты пропорционально-

сти в законе Гука в напряженном кристалле $B_{ikl\dots}$ (модули Бирча) и коэффициенты распространения звука в напряженном кристалле $A_{ikl\dots}$. Обычно при этом в качестве параметров разложения применяют лагранжевый тензор дисторсии $u_{\alpha\beta}$. Модули Браггера $C_{\alpha,\beta,\gamma}$ общеприняты, однако иногда удобнее использовать параметры деформации γ_i , которые имеют наглядный физический смысл.

Параметры γ_i вводятся так, чтобы они обращались в нуль при исчезновении деформации, а соответствующими им деформациями являются: всестороннее сжатие γ_1 , одноосные сжатия γ_2, γ_3 и сдвиги $\gamma_4, \gamma_5, \gamma_6$. Если имеются несколько атомов в элементарной ячейке, то параметры $\gamma_7, \gamma_8, \dots$ описывают относительные смещения этих атомов при деформации кристалла. По определению для одноатомного кристалла тензор дисторсии $u_{\alpha\beta}$ выражается через γ_i следующим образом (см., напр., [25]):

$$\begin{aligned} 1+u_{11} &= (1+\gamma_1)^{1/3} (1+\gamma_2)^{-1/3} (1+\gamma_3)^{-1/2} = f_1(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3), \\ 1+u_{22} &= (1+\gamma_1)^{1/3} (1+\gamma_2)^{-1/3} (1+\gamma_3)^{-1/2} = f_2(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3), \\ 1+u_{33} &= (1+\gamma_1)^{1/3} (1+\gamma_2)^{2/3} = f_3(\gamma_1, \gamma_2), \\ u_{23} &= \gamma_4, \quad u_{13} = \gamma_5, \quad u_{12} = \gamma_6, \quad u_{32} = u_{31} = u_{21} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Производная свободной энергии $F(\gamma)$ по параметрам $\gamma_1\text{--}\gamma_6$ определяет упругие модули типа Фукса, физически наглядные при больших деформациях

$$B_{i\dots l} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial^n F(\gamma)}{\partial \gamma_i \dots \partial \gamma_l} \right)_{\gamma=0}. \quad (2)$$

В дальнейшем поведение сжатого кристалла будем описывать этими модулями B_{ik} .

Покажем связь между модулями Браггера C_{ik} , Фукса B_{ik} и Бирча B_{ij} в напряженном кристалле ($p \neq 0$):

$$C_{11} = B_{11} + \frac{4}{3} B_{33} + p, \quad (3)$$

$$C_{12} = B_{11} - \frac{2}{3} B_{33} - p, \quad (4)$$

$$C_{44} = B_{44} + p. \quad (5)$$

Модули Бирча B_{ij} выражаются как

$$\begin{aligned} B_{\alpha\beta\gamma\vartheta} &= C_{\alpha\beta\gamma\vartheta} - p(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\vartheta} + \delta_{\alpha\vartheta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\vartheta}), \\ B_{11} &= B_{44} + \frac{4}{3} B_{33} = C_{11} - p, \end{aligned} \quad (6)$$

$$B_{12} = B_{11} - \frac{2}{3} B_{33} = C_{12} + p,$$

$$B_{44} = B_{44} = C_{44} - p.$$

Модули типа Браггера C_{ij} зависят от давления p , а B_{ik} можно скомпоновать только из модулей Бирча B_{ij} , которые в случае кубического кристалла непосредственно измеряются в ультразвуковых экспериментах. Игнорирование этого обстоятельства приводит к путанице численных значений коэффициента упругости напряженных кристаллов.

3. Результаты расчетов

В работах [12–14] для всего ряда сжатых КИГ были рассчитаны барические зависимости упругих модулей Бирча B_{ij} и отклонений от соотношения Коши $\delta(p)$ с учетом многочастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек. Сравнение теоретических величин $\delta(p)$ с экспериментальными показало адекватность построения теории и модели расчета параметров.

Запишем модули Фукса B_{ij} через полученные параметры в виде

$$\begin{aligned} B_{11} &= \frac{e^2}{6a^4} [2G - H - 2F + 2E - V_t - 2.710107D], \\ B_{33} &= \frac{e^2}{8a^4} [G + 4H + 8F + 2E - 2V_q + V_t - 0.231934D], \\ B_{44} &= \frac{e^2}{4a^4} [G + 2H + 4F - 8V_q + V_t - 0.52494D]. \end{aligned} \quad (7)$$

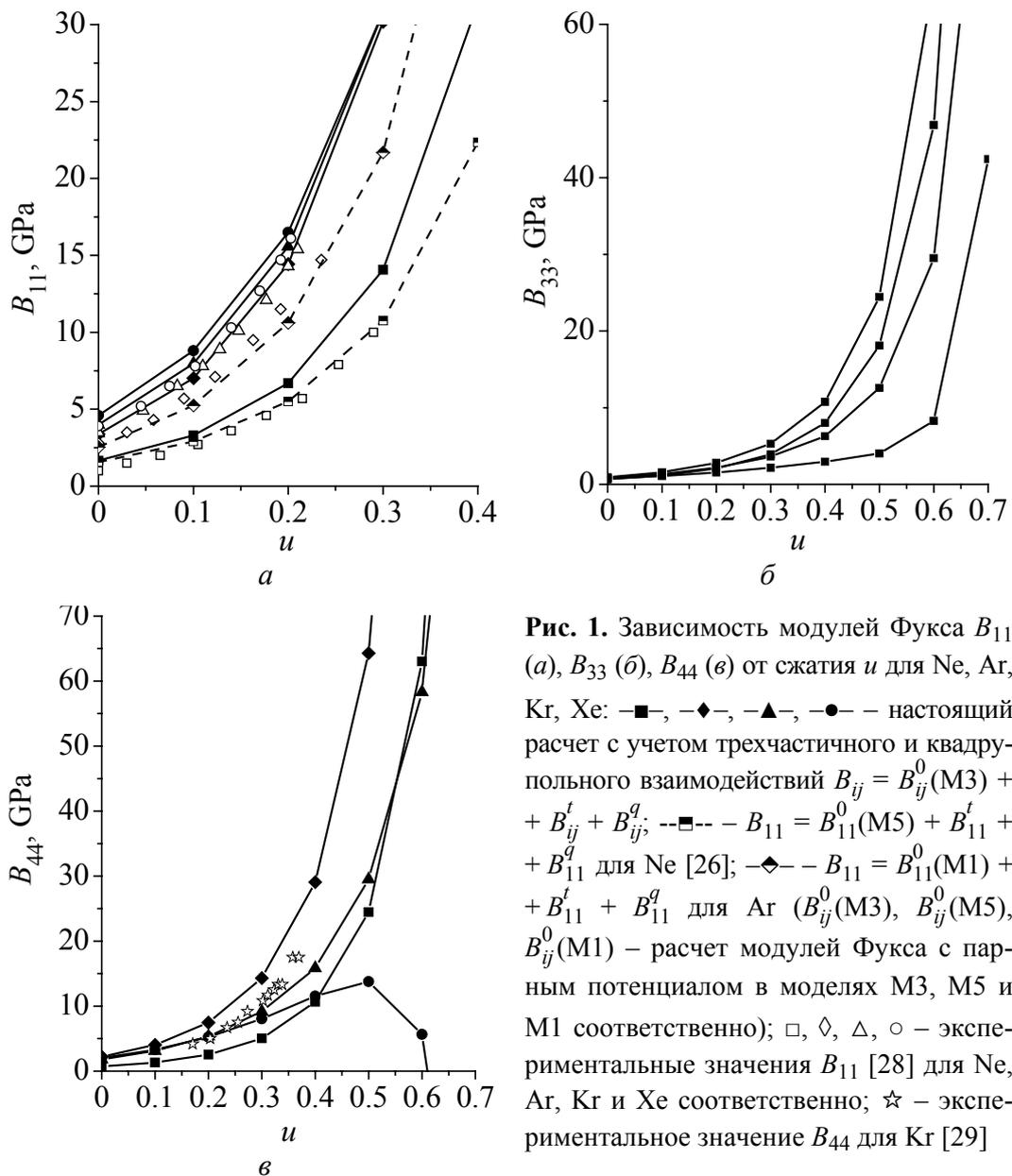
Здесь $H = H_0 + \delta H$, $G = G_0 + \delta G$ (H_0 и G_0 являются первой и второй производными парного короткодействующего потенциала отталкивания $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$ для равновесных расстояний первых соседей; δH , δG – трехчастичные поправки, приводящие к нецентральности парного взаимодействия); F , E – короткодействующие силы между вторыми соседями; V_t , V_q – параметры соответственно трехчастичного и квадрупольного взаимодействий; D определяет взаимодействие Ван-дер-Ваальса.

Модули Фукса (7) можно представить как

$$\begin{aligned} B_{ij} &= B_{ij}^0 + B_{ij}^t + B_{ij}^q, \\ B_{11}^t &= \frac{1}{3} K(p) [2\delta G - \delta H - V_t], \quad B_{11}^q = 0, \quad K(p) = \frac{e^2}{2a^4}, \\ B_{33}^t &= \frac{1}{4} K(p) [\delta G + 4\delta H + V_t], \quad B_{33}^q = K(p) \left[-\frac{1}{2} V_q \right], \\ B_{44}^t &= \frac{1}{2} K(p) [\delta G + 2\delta H + V_t], \quad B_{44}^q = K(p) [-4V_q], \end{aligned} \quad (8)$$

B_{ij}^0 – рассчитанные нами ранее модули упругости Фукса с парным потенциалом в моделях M1, M3 и M5 [26]. В модели M5 короткодействующая часть потенциала отталкивания рассчитана по точной формуле для квадратичной поправки W_2 (см. формулу (6) в [27]) $V_{sr} = E^{(0)} + W_2(S^n)$, в других моделях M3 и M1 W_2 рассчитывается в приближении S^2 . Кроме того, в моделях M3 и M5 переопределена константа Ван-дер-Ваальса $C \rightarrow C(1 - Ae^{\beta r})$ и учтены в расчетах короткодействующих сил «вторые» соседи [26]. В самой простой модели M1 $A = \beta = 0$ и учтены только первые соседи.

На рис. 1 [28,29] приведены результаты расчетов модулей упругости Фукса B_{ij} с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий в зависимости от сжатия $u = \Delta V/V_0$ ($\Delta V = V_0 - V(p)$, где V_0 – объем при $p = 0$)



для Ne, Ar, Kr и Xe. Как видно из рис. 1,а, согласие теоретической величины B_{11} и экспериментальной [28] хорошее и зависит от выбора модели расчета парного потенциала. Так, для Ne в качестве базовой необходимо использовать модель M5 [26], для Ar – M1, а для тяжелых кристаллов инертных газов Kr и Xe – M3 [26]. В отклонениях теории (расчет на основе моделей M3 и M5) от эксперимента заметна определенная тенденция: теоретический модуль B_{11} ложится несколько выше экспериментальных кривых для всего ряда Ne–Xe.

Зависимость сдвигового модуля B_{33} от сжатия имеет тот же характер, что и $B_{11}(u)$, хотя монотонность в ряду Ne, Ar, Kr, Xe нарушается (рис. 1,б).

В Xe при сжатиях $u = 0.6$ сдвиговый модуль B_{44} обращается в нуль. Это указывает на появление абсолютной неустойчивости и необходимости фазового перехода. Действительно, такой переход был экспериментально обнаружен в [30]. Это переход из промежуточной плотноупакованной в ГПУ-фазу при 75 GPa непосредственно перед металлизацией, происходящей при $u = 0.65$ (132 GPa) [31].

Отметим, что при высоком давлении учет трехчастичного и квадрупольного взаимодействий приводит к нарушению линейной барической зависимости, характерной для $B_{ij}^0(p)$ и $B_{11}^0(p)$ [14,26].

4. Упругая анизотропия Зенера

Анизотропия является следствием того, что в структуре кристалла в разных направлениях различны расстояния и силы связи между атомами, и проявляется тем сильнее, чем ниже симметрия кристаллов. Количественно упругую анизотропию оценивают по максимальному различию модулей упругости. Так, коэффициент упругой анизотропии Зенера для кристаллов с кубической симметрией определяется как отношение двух сдвиговых модулей:

$$A_Z = \frac{2B_{44}}{B_{11} - B_{12}} = \frac{B_{44}}{B_{33}}, \quad (9)$$

где $A_Z = 1$, если материал изотропный. Модуль B_{44} относится к сдвигу всей плоскости (100) в произвольном направлении, а B_{33} – к сдвигу через плоскости (110) в направлении $[1 \bar{1} 0]$ [16].

На рис. 2 [19,29,32–35] упругая анизотропия Зенера A_Z представлена как функция давления для Ne, Ar, Kr и Xe. Для экспериментальных данных Ne характерно быстрое уменьшение от 4.9 при $p = 5$ GPa до 3.6 при $p = 7$ GPa [32]. Как видно из рис. 2,а, наш расчет A_Z для Ne расположен ниже экспериментальной кривой [32] и расчетов в теории функционала плотности (density functional theory – DFT) [19].

Экспериментальная зависимость коэффициента Зенера A_Z от давления была определена до 30 GPa [33] и 70 GPa [34] для Ar и до 8 GPa [29] – для Kr. На рис. 2,б,в видно, что полученные нами значения A_Z ложатся между 2.8 и 2.5 и с ростом давления стремятся к изотропному пределу $A_Z = 1$.

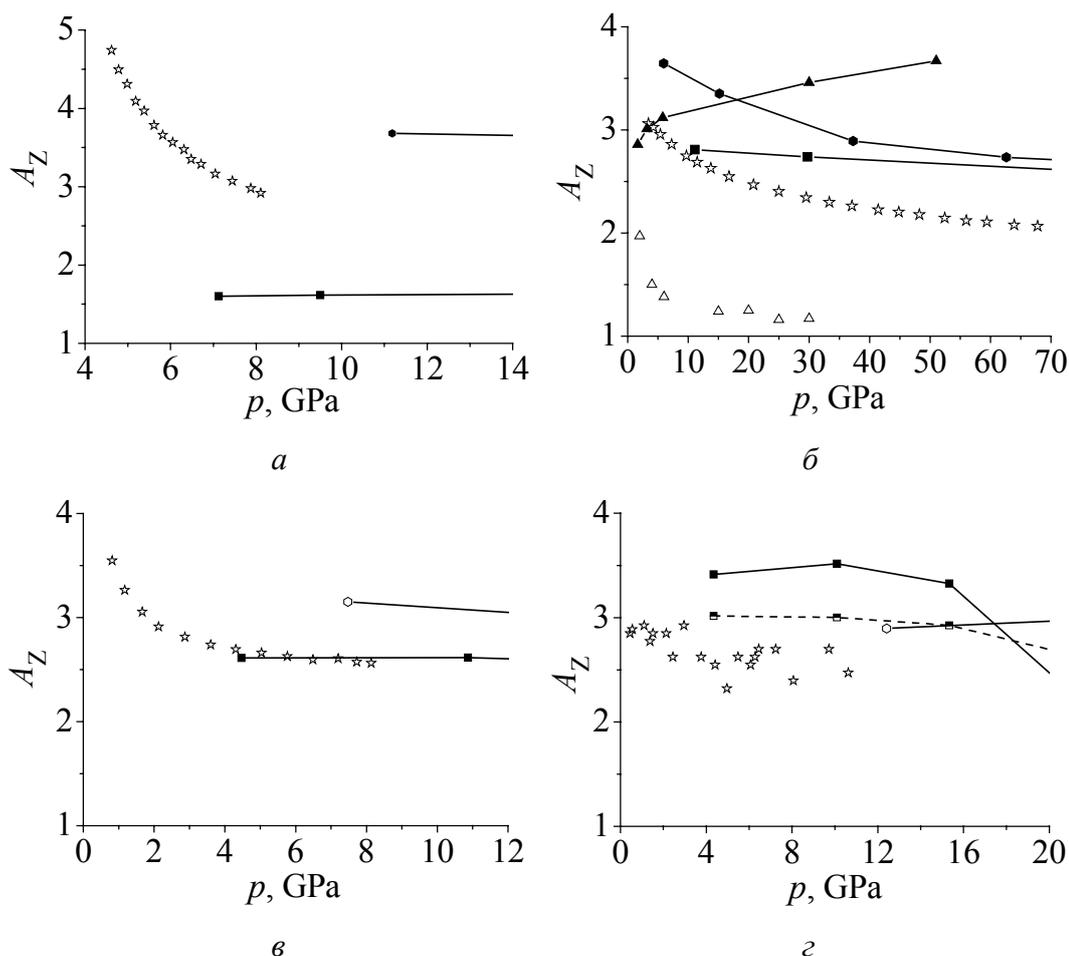


Рис. 2. Зависимость коэффициента упругой анизотропии Зенера A_Z от давления для Ne (а), Ar (б), Kr (в) и Xe (г): —■— — настоящий расчет с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий; --■-- — наш расчет на основе парного потенциала; —○— — расчет в DFT [19]; ☆ — эксперимент для Ne [32], Ar [34], Kr [29], Xe [35]; —▲— — теоретический расчет A_Z , полученный в работе [33]; △ — эксперимент [33]

Как можно видеть, наши результаты для Ar и Kr согласуются с экспериментом [29,34] и расчетами других авторов [19,33] довольно хорошо. На примере Ar хорошо видно различие в экспериментальных данных, полученных группами авторов Шимизу и др. [34] и Гримсдич и др. [33]. Это различие объясняется тем, что авторы [33,36] измеряли барическую зависимость продольной акустической скорости для произвольных неизвестных направлений в монокристаллах Ar и Kr без определения ориентации кристалла. В отличие от них Шимизу с коллегами [29,32,34,35] при измерении модулей упругости проводили идентификацию ориентации кристалла для каждого давления.

Как видно на рис. 2,г, наш расчет A_Z для Xe, основанный на парном потенциале, находится в хорошем согласии с экспериментом [35] и соответствует классической зависимости $A_Z(p)$. Рассчитанные величины A_Z с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий ложатся несколько выше,

чем экспериментальные данные, и начиная с 15 GPa быстро стремятся к нулю, демонстрируя неустойчивость ГЦК-фазы. В работе [30] при рентгеновском исследовании сжатого Хе было показано, что ГЦК-Хе начиная с $p = 14$ GPa превращается в промежуточную плотноупакованную фазу, а затем полностью преобразуется в ГПУ-структуру при 75 GPa.

Как можно увидеть из рис. 2, общим для экспериментальных результатов всего ряда Ne–Хе [29,32–35] является уменьшение коэффициента упругой анизотропии Зенера A_Z с ростом давления и стремление к изотропному пределу $A_Z = 1$. Однако, как отмечается в работах [37,38], для КИГ характерно увеличение теоретической упругой анизотропии с ростом давления, что противоречит эксперименту. Результат расчетов коэффициента упругой анизотропии Зенера в широком интервале давления (сжатия) представлен в таблице и на рис. 3. Полученные нами величины A_Z постепенно увеличиваются до определенного сжатия подобно другим теоретическим работам [33,37,38]. Однако начиная со сжатий $u = 0.6$ в легких кристаллах Ne и Ar, $u = 0.4$ – в Kr и $u = 0.5$ – в Хе наблюдается уменьшение A_Z и стремление его к изотропному пределу $A_Z = 1$, что соответствует эксперименту.

Таблица

Коэффициент упругой анизотропии Зенера A_Z с учетом многочастичного и квадрупольного взаимодействий

u	Ne		Ar		Kr		Xe	
	p , GPa	A_Z	p , GPa	A_Z	p , GPa	A_Z	p , GPa	A_Z
0	0.12577	1.077625	0.016293	2.434	0.003	2.175	-0.034	2.7025
0.1	0.39583	1.160236	0.507104	2.560	0.543	2.340	0.527	3.0353
0.2	0.99819	1.22918	1.650368	2.651	1.749	2.464	1.740	3.3602
0.3	2.40156	1.285417	4.358211	2.703	4.468	2.533	4.349	3.6952
0.4	5.9108	1.32799	11.12668	2.702	10.870	2.523	10.096	3.9254
0.5	15.64443	1.352117	29.70535	2.629	27.190	2.349	23.454	2.4811
0.6	47.04933	1.344672	88.87489	2.452	74.576	1.977	57.653	0.6841
0.7	174.8627	1.272939	328.9479	2.137	245.234	1.447	–	–
0.8	952.7774	1.058673	1842.881	1.662	–	–	–	–

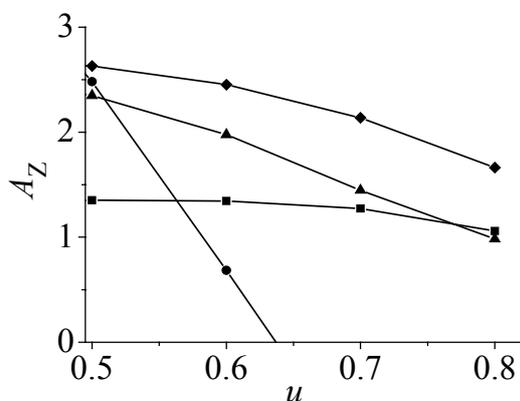


Рис. 3. Зависимость коэффициента упругой анизотропии Зенера A_Z от сжатия для ряда Ne–Хе: —■—, —◆—, —▲—, —●— — настоящий расчет с учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий для Ne, Ar, Kr и Хе соответственно

5. Заключение

В 2000 г. авторы [39] на примере выборочных термодинамических и упругих свойств неона при $p = 0$ показали, что ни один из имеющихся простых модельных потенциалов не может адекватно описать сколько-нибудь значительную совокупность свойств КИГ в хорошем согласии с экспериментом даже при нормальном давлении.

Для описания свойств КИГ под давлением в современных теоретических работах [19,37,38,40–42] авторы используют различные модели и приближения для межатомных потенциалов, а именно к парным эмпирическим потенциалам добавляют многочастичные поправки (модель Лубера [43]) [40,42], используют многочастичный потенциал Лундквиста [38], включающий в себя вклад энергии нулевых колебаний [44], разрабатывают аналитический межатомный потенциал отталкивания за счет перекрытия атомов окружения на основе теории неортогональной сильной связи для систем с заполненными оболочками [41].

Из большого числа теоретических работ по атомным и электронным свойствам сжатых КИГ за последние 10–15 лет следует выделить *ab initio* расчеты на основе DFT [45] и приближения локальной плотности (local density approximation – LDA) для обменно-корреляционного потенциала [46]. Это работы по упругим свойствам, фазовым переходам, электронной структуре и колебательным свойствам КИГ под давлением [19,37,47–50]. Авторы работы [19] предполагают, что увеличение плотности заряда в результате сжатия приведет к улучшению приближения LDA, хотя известно, что LDA плохо описывает системы, связанные такими слабыми силами, как силы Ван-дер-Ваальса [51]. В работе [50] авторы «представляют впервые *ab initio* исследование динамики решетки ГЦК-Хе. Не только как исследование, полезное для получения термодинамических свойств ксенона самого по себе, но также и для того, чтобы проверить пригодность техники функционала плотности и псевдопотенциала для этого класса материалов».

Как в теории функционала плотности, так и в различных моделях трехчастичного взаимодействия в КИГ удастся довольно успешно описать ГЦК–ГПУ-переход [43,47], уравнения состояния [42,19], упругие свойства, включая отрицательное отклонение от соотношения Коши в КИГ в широкой области давления [19,37,38,40,41 и др.]. Однако хорошее согласие с экспериментом рассчитанного отклонения от соотношения Коши $\delta(p)$ получилось у ряда авторов только для Ag [19,37,38,40,41], поскольку в нем преобладает многочастичное взаимодействие. Основной ошибкой в этих работах при описании свойств КИГ является недостаточный учет или игнорирование деформации электронных оболочек атомов.

Общий подход (см. [12] и ссылки там) к построению адиабатического потенциала U для ряда Ne–Xe позволяет выяснить наиболее важные взаимодействия в них, т.е. структуру межатомных потенциалов. Обоснованная достаточно точная форма адиабатического потенциала, полученная ранее в

предположении парного межатомного взаимодействия [52–54], была обобщена на случай для n -атомного взаимодействия [15]. Развитая теория позволяет вычислить короткодействующий потенциал отталкивания индивидуально для каждого кристалла ряда Ne–Xe с учетом многочастичного и квадрупольного взаимодействий. Для Ne в короткодействующем парном потенциале отталкивания требуется включение в адиабатический потенциал слагаемых высших порядков по интегралам перекрытия. Для остальных кристаллов ряда достаточно ограничиться квадратичным приближением по интегралам перекрытия.

Проведенный анализ расчетов и измерений модулей упругости напряженного кристалла показал, что межатомный потенциал с учетом трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек атомов отражает все существенные черты поведения КИГ под давлением.

В заключение подведем итоги исследованию упругих свойств и сделаем ряд замечаний.

1. Из сравнения различных экспериментальных данных [29,32–36] видно, что измерение упругих модулей очень чувствительно к методике и начальным условиям.

2. Важна правильная интерпретация типов измеряемых упругих модулей.

3. Линейная барическая зависимость модулей упругости при высоком давлении, характерная для $V_{ij}^0(p)$, рассчитанных на основе парного потенциала, нарушается при учете трехчастичного и квадрупольного взаимодействий. Это обеспечивает обращение в нуль сдвигового модуля B_{44} для Xe при 75 GPa, что соответствует ГЦК–ГПУ-переходу.

4. Индивидуальная зависимость отклонения от соотношения Коши $\delta(p)$ для каждого из кристаллов есть результат двух конкурирующих взаимодействий – многочастичного и квадрупольного, проявляющегося в квадрупольной деформации электронных оболочек атомов при смещениях ядер.

5. Адекватное воспроизведение экспериментальной барической зависимости отклонения от соотношения Коши $\delta(p)$ может служить основным критерием правильности построения теории.

6. В эмпирических потенциалах при определении поправки к парному потенциалу за счет трехчастичного взаимодействия следует опираться не на экспериментальный сдвиговый модуль B_{44} , а на B_{12} , поскольку именно в этот модуль основной вклад вносит трехчастичное взаимодействие, а в модуль B_{44} – квадрупольное взаимодействие.

7. *Ab initio* теория функционала плотности недостаточно точно учитывает деформацию электронных оболочек, а эмпирические расчеты ее игнорируют.

1. К.Б. Толыго, ЖЭТФ **20**, 497 (1950).
2. К.Б. Толыго, УФЖ **2**, 242 (1957).
3. К.Б. Толыго, УФЖ **4**, 72 (1959).

4. К.Б. Толыго, ФТТ **3**, 943 (1961).
5. И.Г. Заславская, К.Б. Толыго, УФЖ **1**, 226 (1956).
6. З.А. Демиденко, Т.И. Кучер, К.Б. Толыго, ФТТ **3**, 2482 (1961).
7. З.А. Демиденко, К.Б. Толыго, ФТТ **3**, 3435 (1961).
8. К.Б. Толыго, Е.П. Троицкая, ФТТ **13**, 1135 (1971).
9. К.В. Толруго, Phys. Status Solidi **B56**, 591 (1973).
10. О.Н. Болонин, К.Б. Толыго, ФТТ **15**, 1674 (1973).
11. Е.П. Троицкая, Вал.В. Чабаненко, Е.Е. Горбенко, ФТТ **49**, 2055 (2007).
12. Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко, И.В. Жихарев, Е.Е. Горбенко, Е.А. Пилипенко, ФТВД **21**, № 4, 7 (2011).
13. Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко, И.В. Жихарев, Е.Е. Горбенко, Е.А. Пилипенко, ФТВД **22**, № 2, 37 (2012).
14. Е.П. Троицкая, В.В. Чабаненко, Е.А. Пилипенко, Е.Е. Горбенко, ФТВД **23**, № 4, 20 (2013).
15. Е.П. Троицкая, Вал.В. Чабаненко, И.В. Жихарев, Е.Е. Горбенко, Е.А. Пилипенко, ФТВД **20**, № 2, 1 (2010).
16. С. Zener, Phys. Rev. **71**, 846 (1947).
17. В.В. Karki, L. Stixrude, S.J. Clark, M.C. Warren, G.J. Ackland, J. Crain, American Mineralogist **82**, 51 (1997).
18. F. Jona, P.M. Marcus, J. Phys.: Condens. Matter **13**, 5507 (2001).
19. T. Tsuchiya and K. Kawamura, J. Chem. Phys. **117**, 5859 (2002).
20. V.D. Farajov, Z.A. Iskenderzade, E.K. Kasumova, E.M. Kurbanov, Inorg. Mater. **41**, 911 (2005).
21. H. Ledbetter, A. Migliori, J. Appl. Phys. **100**, 063516 (2006).
22. S.I. Ranganathan, M. Ostoja-Starzewski, Phys. Rev. Lett. **101**, 055504 (2008).
23. F.D. Murnaghan, Finite Deformation of Elastic Solids, J. Wiley, New York (1951).
24. D. Wallace, Solid State Phys. **25**, 301 (1970).
25. В.Г. Барьяхтар, Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая, Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Атомные свойства металлов, Наукова думка, Киев (1990).
26. E.V. Zarochentsev, V.N. Varyukhin, E.P. Troitskaya, Val.V. Chabanenko, and E.E. Horbenko, Phys. Status Solidi **B243**, 2672 (2006).
27. Е.П. Троицкая, Е.А. Пилипенко, ФТВД **24**, № 2, 7 (2014).
28. M.S. Anderson, C.A. Swenson, J. Phys. Chem. Solids **36**, 145 (1975).
29. H. Shimizu, N. Saitoh, and S. Sasaki, Phys. Rev. **B57**, 230 (1998).
30. A.P. Jephcoat, H.K. Mao, L.W. Finger, D.F. Lox, R.J. Hemley, C.S. Zha, Phys. Rev. Lett. **59**, 2670 (1987).
31. K.A. Goettel, J.H. Eggert, I.F. Silvera, W.C. Moss, Phys. Rev. Lett. **62**, 665 (1989).
32. H. Shimizu, H. Imaeda, T. Kume, and S. Sasaki, Phys. Rev. **B71**, 014108 (2005).
33. M. Grimsditch, P. Loubeyre, A. Polian, Phys. Rev. **B33**, 7192 (1986).
34. H. Shimizu, H. Tashiro, T. Kume, and S. Sasaki, Phys. Rev. Lett. **86**, 4568 (2001).
35. S. Sasaki, N. Wada, T. Kumi, and H. Shimizu, J. Raman Spectroscopy **40**, 121 (2009).
36. A. Polian, J.V. Desson, M. Grimsditch, and W.A. Grosshans, Phys. Rev. **B39**, 1332 (1989).
37. T. Iitaka and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. **B65**, 012103 (2001).
38. S. Gupta, S.C. Goyal, Sci China Ser D-Earth Sci **52**, 1599 (2009).

39. *D. Acocella, G.K. Horton, E.R. Cowley*, Phys. Rev. **B61**, 8753 (2000).
40. *E. Pechenic, I. Kelson, G. Makov*, Phys. Rev. **B78**, 134109 (2008).
41. *M. Aoki and T. Kurokawa*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 236228 (2007).
42. *Yu.A. Freiman and S.M. Tretyak*, ФНТ **33**, 719 (2007) [Low Temp. Phys. **33**, 545 (2007)].
43. *P. Loubeyre*, Phys. Rev. **B37**, 5432 (1988).
44. *M.P. Verma, R.K. Singh*, Phys. Status Solidi **33**, 769 (1969).
45. *P. Hohenberg and W. Kohn*, Phys. Rev. **B136**, 864 (1964).
46. *W. Kohn and L.J. Sham*, Phys. Rev. **A140**, 1133 (1965).
47. *I. Kwon, L.A. Collins, J.D. Kress, and N. Troullier*, Phys. Rev. **B52**, 15165 (1995).
48. *W.A. Caldwell, J.H. Nguyen, B.G. Pfrommer, F. Mauri, S.G. Louie, and R. Jeanloz*, Science **277**, 930 (1997).
49. *M. Springborg*, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 9869 (2000).
50. *J.K. Dewhurst, R. Ahuja, S. Li, and B. Johansson*, Phys. Rev. Lett. **88**, 075504 (2002).
51. *W. Kohn, Y. Meir, and D.E. Makarov*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4153 (1998).
52. *Е.П. Троицкая*, Автореф. дисс. ... докт. физ.-мат. наук, Киев (1987).
53. *Ю.В. Еремейченкова Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая*, ТМФ **102**, 498 (1996).
54. *Е.В. Зароченцев, Е.П. Троицкая*, ФТТ **43**, 1292 (2001).

E.P. Troitskaya, I.V. Zhikharev, E.A. Pilipenko

ELASTIC PROPERTIES OF COMPRESSED RARE-GAS CRYSTALS IN THE MODEL OF DEFORMABLE ATOMS

The elastic properties of compressed rare-gas crystals (RGC) Ne, Ar, Kr and Xe are investigated in the model of deformable and polarizable atoms. The Fuchs elastic moduli and Zener elastic anisotropy coefficient have been calculated with inclusion of the three-body and quadrupole interactions over a wide range of pressures. We have compared the obtained results with the experiment and the results of other authors. We observe the vanishing of the shear modulus B_{44} for Xe at a compression of 0.6, which corresponds to the transition from the fcc phase to the hcp phase at 75 GPa.

Keywords: rare-gas crystals, deformation of electron shells, quadrupole interaction, many-body interactions, high pressure, short-range repulsion, Zener elastic anisotropy coefficient

Fig. 1. Dependence of the Fuchs elastic moduli B_{11} (a), B_{33} (b), B_{44} (c) on the compression u for Ne, Ar, Kr, Xe: \blacksquare , \blacklozenge , \blacktriangle , \bullet – the presented calculation with inclusion of the three-body and quadrupole interactions $B_{ij} = B_{ij}^0(\text{M3}) + B_{ij}^t + B_{ij}^q$; \blacksquare – $B_{11} = B_{11}^0(\text{M5}) + B_{11}^t + B_{11}^q$ for Ne [26]; \blacklozenge – $B_{11} = B_{11}^0(\text{M1}) + B_{11}^t + B_{11}^q$ for Ar ($B_{ij}^0(\text{M3})$, $B_{ij}^0(\text{M5})$, $B_{ij}^0(\text{M1})$ – calculation of the Fuchs elastic moduli with pair interaction potentials previously calculated in the models M3, M5 and M1, respectively); \square , \diamond , \triangle , \circ – experimental data B_{11} [28] for Ne, Ar, Kr и Xe respectively; \star – experimental data B_{44} for Kr [29]

Fig. 2. Pressure dependences of the Zener elastic anisotropy coefficient A_Z for Ne (a), Ar (б), Kr (в) and Xe (г): —■— the presented calculation with inclusion of the three-body and quadrupole interactions; --■-- calculation based on the pair interaction potentials; —◇— DFT calculation [19]; ☆ — experiment for Ne [32], Ar [34], Kr [29], Xe [35]; —▲— theoretical calculation A_Z result obtained in ref. [33]]; △ — experiment [33]

Fig. 3. Dependence of the Zener elastic anisotropy coefficient A_Z on the compression u for the series Ne–Xe: —■—, —◆—, —▲—, —●— the presented calculation with inclusion of the three-body and quadrupole interactions for Ne, Ar, Kr and Xe, respectively