

УДК 538.224

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛОВ С ТЯЖЕЛЫМИ d - И f -ЭЛЕМЕНТАМИ

*И. В. Соловьев, А. Б. Шик, В. П. Антропов,
А. И. Лихтенштейн, В. А. Губанов, О. К. Андерсен*

Предложена методика самосогласованных расчетов электронной структуры твердых тел при одновременном учете магнитной поляризации и спин-орбитального взаимодействия. Данный подход основан на решении уравнения Дирака в магнитном поле без применения теории возмущений и линеаризованном методе МТ орбиталей для нахождения одноэлектронного спектра кристалла. Рассмотрена возможность определения малых параметров магнитной анизотропии на основе анализа первой вариации полной энергии по отклонению намагниченности от оси симметрии кристалла. Проведены самосогласованные спин-поляризованные релятивистские расчеты электронной структуры переходных (Fe, Co, Ni) и трансурановых (Pu, Am) металлов. Вычислены спиновые и орбитальные моменты, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Показано, что последовательный учет релятивистских эффектов приводит к немагнитному основному состоянию α -Pu в отличие от скалярно-релятивистского подхода.

Одной из актуальных задач теории электронных состояний в магнитных металлах является одновременный учет эффектов внутриатомной обменной поляризации и спин-орбитальной связи. В переходных металлах релятивистские эффекты малы, однако они приводят к принципиальному результату — зависимости полной энергии кристалла от направления намагниченности, т. е. к магнитной анизотропии. Для трансурановых металлов с незаполненной $5f$ -оболочкой обменное и спин-орбитальное расщепление одного порядка и поэтому их необходимо учитывать одновременно.

Обобщение теории функционала спиновой плотности на релятивистское исследование многочастичных эффектов было сделано в работах [1, 2]. В этом случае пренебрежение слабыми диамагнитными эффектами приводит к одноэлектронному уравнению Кона—Шэма—Дирака с эффективными скалярным потенциалом и магнитным полем, включающим обменно-корреляционные эффекты [3]. Методика спин-поляризованных релятивистских расчетов на основе формализма ККР и функционала плотности была развита недавно в работах [3-5]. При этом одноцентровая матрица рассеяния становится недиагональной в базисе шаровых спиноров, что значительно усложняет проведение расчетов зонной структуры.

Поэтому к настоящему времени существуют лишь единичные попытки применения данной методики к расчету электронной структуры кристаллов. Исследование взаимного влияния обменных и релятивистских эффектов было проведено для ферромагнитных Fe и Gd [6] и δ -Pu [7]. Во всех указанных работах использовался потенциал, полученный в скалярно-релятивистских расчетах, и не проводилось вычисление зарядовых и спиновых плотностей, необходимых для самосогласования. Лишь для случая изолированных атомов были проведены самосогласованные расчеты [8].

Стандартный способ учета спин-орбитального взаимодействия в линеаризованных зонных подходах (типа ЛМТО) основан на применении теории

возмущений [9]. Он позволяет рассчитать не только спиновый момент в ферромагнитных кристаллах, но и наведенный орбитальный момент [10]. При этом в случае $U\text{Pt}_3$ [11] данный подход приводит к наведенному орбитальному моменту, превышающему спиновый, что ставит под сомнение применение теории возмущений для кристаллов, содержащих тяжелые элементы. Попытка упрощенного включения эффектов спин-орбитального зацепления без теории возмущений была предпринята в работе [12] на примере несамосогласованного расчета ферромагнитного Ni.

В данной работе предложена последовательная методика самосогласованных спин-поляризованных релятивистских расчетов электронной структуры магнитных кристаллов линеаризованным методом МТ орбиталей (ЛМТО). В качестве иллюстрации возможностей нового подхода приведены результаты расчета переходных (Fe, Co, Ni) и трансурановых (α - и δ -Pu, Am) металлов.

1. Методика расчетов

Рассмотрим одноэлектронное уравнение Дирака [3, 4] с эффективным потенциалом $V(r)$, включающим магнитное поле в виде $\beta \sigma B(r)$ (где β , σ — обычные матрицы Дирака и Паули). В этом случае решение в атомной сфере

$$\Psi(r) = \sum_{k\mu} \begin{pmatrix} g_k^\mu(r) \chi_k^\mu(\hat{r}) \\ i f_k^\mu(r) \chi_{-k}^\mu(\hat{r}) \end{pmatrix}$$

с магнитным полем, направленным вдоль оси z , удовлетворяет системе зацепляющихся уравнений [3]

$$\begin{aligned} c \left(\frac{d}{dr} g_k^\mu + \frac{k+1}{r} g_k^\mu \right) &= \left(E - V(r) + \frac{c^2}{2} \right) f_k^\mu + B(r) \sum_{k'} \sigma_{k'k, \mu}^z f_{k'}^\mu, \\ c \left(\frac{d}{dr} f_k^\mu + \frac{1-k}{r} f_k^\mu \right) &= \left(E - V(r) - \frac{c^2}{2} \right) g_k^\mu - B(r) \sum_{k'} \sigma_{k'k, \mu}^z g_{k'}^\mu, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\chi_k^\mu(\hat{r})$ — шаровые спиноры; $\sigma_{k'k, \mu}^z = \langle \chi_k^\mu | \hat{\sigma}_z | \chi_{k'}^\mu \rangle$; c — скорость света; масса электрона $m = 1/2$; k — релятивистское квантовое число; μ — магнитное квантовое число,

$$k = l, \quad j = l - 1/2; \quad k = -l - 1, \quad j = l + 1/2.$$

Стандартное приближение состоит в пренебрежении слабым зацеплением между состояниями l, j и $l \pm 2, j \pm 1$, имеющим порядок $(1/c^2) (d/dr) \times B(r)$, и в учете основного взаимодействия между состояниями с одинаковым l и различными значениями полных моментов $j = l \pm 1/2$ (k и $k' = -k - 1$). В этом случае бесконечная цепочка уравнений (1) сводится к системе четырех зацепляющихся уравнений для $(g_{k\alpha}^\mu, f_{k\alpha}^\mu, g_{k'\alpha}^\mu, f_{k'\alpha}^\mu)$, имеющих пару линейно-независимых регулярных решений ($\alpha = 1, 2$), которые всегда могут быть выбраны ортогональными.

Используя обычное условие сшивки регулярного решения внутри МТ сферы радиуса s с общим решением вне сферы [3], можно получить выражение для одноузельной матрицы рассеяния $\| t_{kk'}^\mu \|$ в виде

$$\hat{t} = \frac{1}{i p} \hat{W}^{-1}(\Psi, k^+) \hat{W}(\Psi, j), \quad (2)$$

где матричный «вронскиан» имеет вид

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} W(\Psi_{k1}, n_l) & W(\Psi_{k'1}, n_l) \\ W(\Psi_{k2}, n_l) & W(\Psi_{k'2}, n_l) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$W(\Psi_{k\alpha}, n_l) = g_{k\alpha}(s) \left[\frac{-cp}{E + c^2/2} \right] s_k n_l(p s) - f_{k\alpha}(s) n_l(p s),$$

здесь $n_i = k_i^+$, j_i (соответственно сферические функции Ханкеля и Бесселя), $s_k = k/|k|$, $l = l - s_k$, p — релятивистский импульс.

В приближении атомных сфер ($p \rightarrow 0$) легко получить выражение для матрицы, соответствующей потенциальной функции в методе ЛМТО [9]

$$\hat{P}(E) = 2(2l+1)(\hat{D}(E) + l + 1)(\hat{D}(E) - l)^{-1}, \quad (4)$$

где матрицы логарифмических производных равны

$$\hat{D}(E) = cs f_{\hat{g}}^{-1} - \hat{k} - \hat{1}, \quad (5)$$

здесь

$$f = \begin{pmatrix} f_{k1}(s) & f_{k2}(s) \\ f_{k'1}(s) & f_{k'2}(s) \end{pmatrix}, \quad \hat{g} = \begin{pmatrix} g_{k1}(s) & g_{k2}(s) \\ g_{k'1}(s) & g_{k'2}(s) \end{pmatrix}.$$

Используя обобщенную теорему Грина [13] для магнитно-релятивистского случая, можно получить следующую связь между решениями уравнения (1):

$$g_{k1} f_{k2} + g_{k'1} f_{k'2} = g_{k2} f_{k1} + g_{k'2} f_{k'1}, \quad (6)$$

откуда следует, что \hat{D} -, \hat{t} -, \hat{P} -матрицы являются симметричными. Отметим, что это свойство выполняется и для t -матрицы в ККР подходе, как было показано численно в [3].

Для нахождения удобного линеаризованного представления для потенциальной матрицы $\hat{P}(E)$ разложим волновые функции в ряд Тейлора относительно произвольной энергии E_0 с точностью до членов второго порядка по $E - E_0$. При этом возникают существенные отличия от обычного скалярно-релятивистского подхода [13]. Зацепление радиальных решений приводит, в частности, к следующему соотношению:

$$\hat{g}_v^T (\hat{D}_v - \hat{D}_v) \hat{g}_v = \hat{g}_v^T (\hat{D}_v - \hat{D}_v^T) \hat{g}_v, \quad (7)$$

где \hat{g}_v , \hat{g}_v^T — матрицы первой и второй производных от $\hat{g}(E)$ по энергии в точке E_0 ; \hat{D}_v и \hat{D}_v^T — матрицы вида (5), построенные на (\hat{g}_v, \hat{f}_v) и $(\hat{g}_v^T, \hat{f}_v^T)$. В магнитно-релятивистском подходе $\hat{D}_v \neq \hat{D}_v^T$, поэтому $\hat{D}_v \neq \hat{D}_v^T$, в отличие от скалярно-релятивистского случая. Окончательное выражение для двух первых членов разложения функции $[\hat{D}(E) - \hat{D}_0]^{-1}$ в ряд Лорана имеет вид

$$[\hat{D}(E) - \hat{D}_0]^{-1} = -(\hat{M} s^2 \varepsilon)^{-1} + \hat{a}, \quad (8)$$

где $\varepsilon = E - E_0$, а матрицы фундаментальных параметров равны

$$\hat{M} = [s^3 \hat{g}_v \hat{g}_v^T]^{-1}, \quad \hat{a} = -1/2 \{ (\hat{D}_v - \hat{D}_v) \hat{1} + (\hat{D}_v - \hat{D}_v^T) \hat{1} \}.$$

Используя выражения (8) и (4), легко найти следующий вид линеаризованной P -матрицы:

$$\hat{P}(E) = \hat{R} (\hat{V} - E \hat{1}) \hat{R}^T + \hat{Q}, \quad (9)$$

где матрицы потенциальных параметров равны

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \sqrt{2s} (2l+1) [\hat{a} (\hat{D}_v - l) + \hat{1}]^{-1} \hat{g}_v, \\ \hat{V} &= E_0 \hat{1} + s \hat{g}_v^T [(\hat{D}_v - l)^{-1} + \hat{a}]^{-1} \hat{g}_v, \\ \hat{Q} &= 2(2l+1) \{ \hat{1} + (2l+1) [\hat{D}_v - l + \hat{a}^{-1}]^{-1} \}. \end{aligned}$$

Удобство линейного подхода по сравнению с теорией ККР [3-5] связано с тем, что нахождение полной матрицы рассеяния кристалла

$$\hat{T}(E) = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \int dk (\hat{P}(E) - \hat{S}(k))^{-1} \quad (10)$$

сводится к определению энергетического спектра эффективного гамильтониана [14]

$$\hat{H}(k) = \hat{V} + \hat{R}^T (\hat{Q} - \hat{S}(k))^{-1} \hat{R}, \quad (11)$$

где $\hat{S}(k)$ — структурные константы метода ЛМТО [13].

Для проведения самосогласованных спин-поляризованных релятивистских расчетов необходимо вычислить зарядовую и спиновую плотности, которые связаны с матричными элементами функции Грина в базисе шаровых спиноров χ_k^u

$$n(E, r) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Sp } \hat{G}(r, r, E), \quad m_z(E, r) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Sp } \hat{\beta} \hat{\alpha}_z \hat{G}(r, r, E). \quad (12)$$

Стандартное представление для функции Грина в релятивистском случае имеет вид [15]

$$\hat{G}(r, r', E) = \begin{pmatrix} \hat{G}^{11}(r, r', E) & \hat{G}^{12}(r, r', E) \\ \hat{G}^{21}(r, r', E) & \hat{G}^{22}(r, r', E) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

\hat{G}^{11} , \hat{G}^{22} в спин-поляризованном релятивистском подходе могут быть представлены в виде матричного произведения

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im } \hat{G}^{11}(r, r', E) = \hat{g}(r, E) \hat{N}(E) \hat{g}(r', E),$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im } \hat{G}^{22}(r, r', E) = \hat{f}(r, E) \hat{N}(E) \hat{f}(r', E),$$

$\hat{N}(E)$ — матрица плотностей состояний

$$N_{ij}(E) = \frac{1}{\Omega_{Bz}} \sum_n \int_{Bz} dk C_i^{*n}(k) C_j^n(k) \delta(E - E_n(k)), \quad (14)$$

$C_i^n(k)$ и $E_n(k)$ — собственные векторы и собственные значения гамильтониана $\hat{H}(k)$ (11); n — номер зоны; \hat{g} , \hat{f} — матрицы решений, введенные ранее (5).

Таким образом, на каждой итерации находится электронный спектр путем диагонализации матрицы (11) размерности $2(L+1)^2$, затем вычисляются недиагональная матрица плотности состояний (14) и определяются зарядовая и спиновая плотности внутри атомной сферы (12). При этом необходимо учитывать понижение полной симметрии кристалла и соответственно увеличение неприводимой части зоны Бриллюэна [16]. Далее, используя обычный формализм функционала спиновой плотности, получаем одноэлектронный потенциал $V^{\uparrow, \downarrow}(r)$ [17]. Тогда, эффективные скалярный потенциал и магнитное поле в уравнении (1) можно найти следующим образом [4]:

$$V(r) = 1/2 (V^{\uparrow}(r) + V^{\downarrow}(r)), \quad B(r) = 1/2 (V^{\uparrow}(r) - V^{\downarrow}(r)). \quad (15)$$

Самосогласование проводилось по эффективному одноэлектронному потенциалу $V^{\uparrow, \downarrow}(r)$, причем в качестве исходной точки брались результаты скалярно-релятивистских самосогласованных расчетов. Для достижения точности в определении магнитного момента 10^{-2} μ_B требовалось порядка 20 зонных итераций.

В этом подходе весьма просто определить не только средний спиновый момент M_s интегрированием спиновой плотности (12), но и наведенный орбитальный момент $M_L = -1/\pi \cdot \text{Im Sp } \hat{L}_z \hat{G}$. Кроме того, здесь представляется возможным исследование эффектов магнитной анизотропии. Вследствие весьма малой энергии анизотропии удобно рассчитывать первую вариацию полной энергии ($\delta E_{\text{анн}}$) кристалла при отклонении намагниченности на угол $\delta\varphi$ вокруг оси поворота \hat{n} . В этом случае изменение одноцентровой матрицы рассеяния запишется через коммутатор \hat{P} и полного момента $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

$$\delta \hat{P}(E) = i \delta\varphi [\hat{n} \hat{J}, \hat{P}(E)]. \quad (16)$$

Используя теорему локальных сил [18] для магнитных возмущений, получим

$$\delta E_{\text{аннз}} = \frac{1}{\pi} \int_{-E_F}^{E_F} \text{Im Sp } \delta \hat{P}(E) \hat{T}(E) dE. \quad (17)$$

Можно показать, что $\delta E_{\text{аннз}} = 0$, когда намагниченность направлена вдоль осей симметрии кристалла. Интегрируя (17) по углам, можно восстановить зависимость $E_{\text{аннз}}(\varphi)$ и определить константы магнитной анизотропии K , и направление осей легкого намагничивания.

2. Обсуждение результатов

Нами были проведены спин-поляризованные релятивистские само-согласованные ЛМТО расчеты ферромагнитных Fe, Co, Ni, α - и δ -Pu, Am при равновесных постоянных решетки. Интегрирование в k -пространстве проводилось методом тетраэдров по 1/16 зоны Бриллюэна ОЦК и ГЦК решеток и по 1/24 зоны ГПУ решетки [16].

В таблице приведены значения спиновых и орбитальных магнитных моментов для рассмотренных d - и f -металлов. Отметим, что для Fe, Co, Ni величины равновесных спиновых моментов практически совпадают со значениями, полученными в скалярно-релятивистском расчете [19]. «Наведенные» орбитальные моменты для ОЦК Fe и ГЦК Ni, вычисленные в магнитном релятивистском расчете, практически идентичны результатам работы [20], полученным в скалярно-релятивистском подходе с учетом спин-орбитального взаимодействия по теории возмущений. Заметные

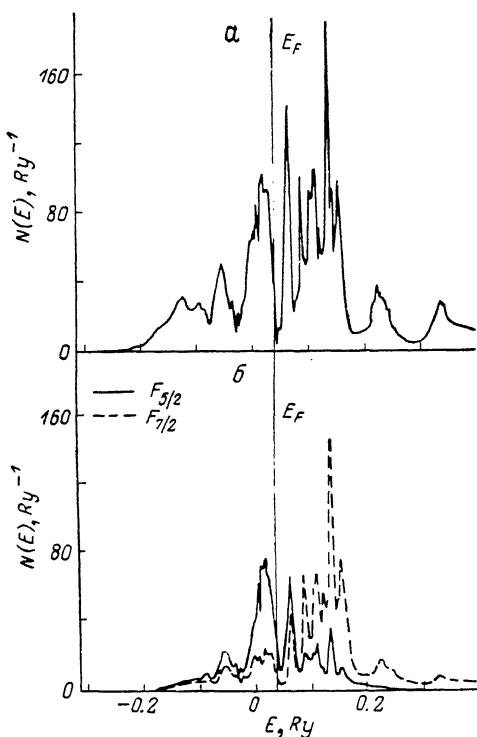


Рис. 1. Полная плотность состояний (а) и парциальные релятивистские 5f-вклады (б) для немагнитного α -Pu.

отличия для M_L возникают в случае ГПУ Co. Если в расчетах по теории возмущений [21] $g_{\text{Co}} = 2.21$, то в нашей работе $g_{\text{Co}} = 2.12$. В то же время

Результаты расчетов спиновых M_S и орбитальных M_L магнитных моментов в спин-поляризованном релятивистском подходе в сравнении с чисто спиновыми скалярно-релятивистскими моментами M_S^*

Металл	Тип решетки	M_S^*/μ_B	M_S/μ_B	M_L/μ_B
Fe	ОЦК	2.22	2.22	0.04
Co	ГЦК	1.63	1.61	0.08
Co	ГПУ	1.60	1.59	0.09
Ni	ГЦК	0.62	0.60	0.05
δ -Pu	ГЦК	5.34	4.50	-2.40
Am	ГЦК	7.02	6.52	-0.89

полученное нами значение полного момента $M = 1.70 \mu_B$ хорошо согласуется с экспериментальными данными $M_{\text{врс}} = 1.71 \mu_B$ [22]. Заметим, что плот-

ности электронных состояний для $3d$ -металлов мало отличаются от нерелятивистских результатов и здесь не приводятся.

Существенно сложнее ситуация в случае $5f$ -металлов, где релятивистские эффекты более значительны и сравнимы с обменными. Если в скалярно-релятивистском расчете спиновый магнитный момент для ГЦК фазы Pu равен соответственно $M_S=3.49 \mu_B$ (объем, соответствующий α -фазе) и $M_S=5.34 \mu_B$ (δ -фаза), то последовательный учет релятивистских

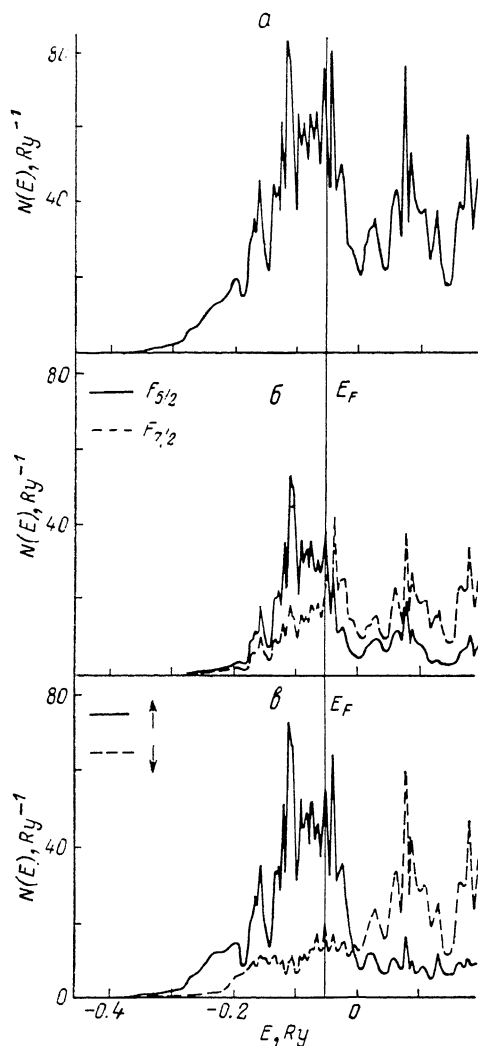


Рис. 2. Полная плотность состояний (а) и парциальные релятивистские $5f$ (б) и спиновые (в) вклады в $N(E)$ для δ -Pu.

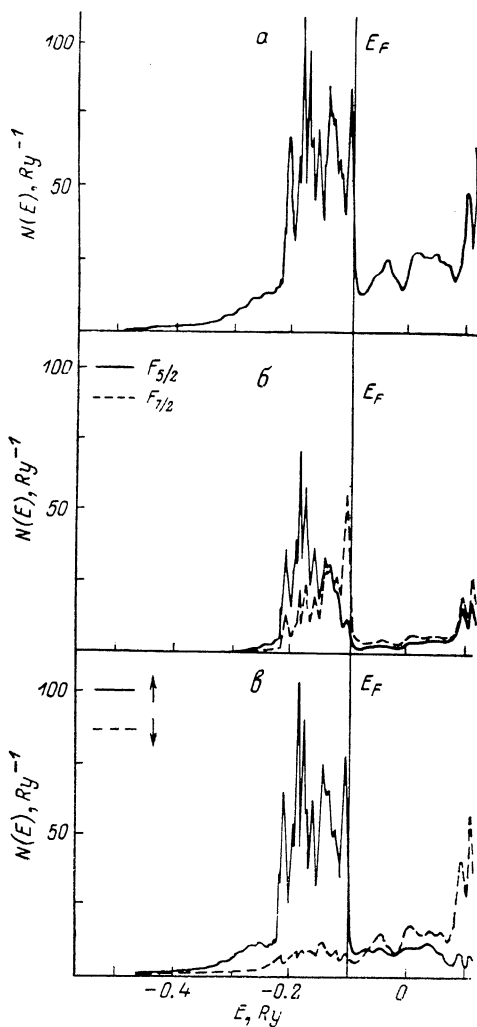


Рис. 3. Полная плотность состояний (а) и парциальные релятивистские $5f$ (б) и спиновые (в) вклады в $N(E)$ для Am.

эффектов приводит к тому, что основное состояние α -фазы становится немагнитным ($M_S=0$), в то время как для δ -фазы спиновый момент уменьшается до $M_S=4.5 \mu_B$ и появляется значительный орбитальный момент, направленный противоположно спиновому ($M_L=-2.4 \mu_B$). Таким образом, первопринципные расчеты свидетельствуют о сильном влиянии релятивистских эффектов на магнитные свойства трансурановых элементов.

Хорошо известно, что америций, имеющий полузаполненную $5f$ -зону, обладает локализованным спиновым моментом и относительно небольшим орбитальным вкладом. Это подтверждается в наших расчетах, приводящих к $M_S=6.52 \mu_B$ и $M_L=-0.89 \mu_B$ в магнитном релятивистском случае и $M_S=7.02 \mu_B$ в скалярно-релятивистском подходе.

Наглядное представление об относительной величине спин-орбитального и обменного взаимодействий дают результаты разделения полной плотности электронных состояний на парциальные «релятивистские» ($N_{f\uparrow/2}$, $N_{f\downarrow/2}$) и «спиновые» (N_{\uparrow} , N_{\downarrow}) составляющие (рис. 1—3). Такое разделение полной матрицы функции Грина магнитного релятивистского расчета достигалось путем проектирования решений уравнения (1) на чисто «релятивистские» (k , μ) и чисто «спиновые» (l , m_s) состояния. Как видно из сопоставления рис. 1 и 2, возникновение спиновой поляризации в δ -фазе Pu приводит к резкому уширению валентной зоны. При этом в δ -Pu эффекты спиновой поляризации и спин-орбитального расщепления практически одного порядка (рис. 2). С другой стороны, для Am (рис. 3) эффекты спиновой поляризации значительно больше спин-орбитального расщепления и в основном определяют вид энергетического спектра. Поскольку в данном случае самосогласованные расчеты приводят к полностью заполненной $5f_{\uparrow}$ -зоне, можно считать спиновый момент америция хорошо локализованным.

В данной работе впервые приведены результаты самосогласованных спин-поляризованных релятивистских расчетов ряда переходных и транс-урановых металлов, свидетельствующие о важности одновременного учета эффектов спин-орбитального зацепления и спиновой поляризации для правильного описания структуры электронных состояний и магнитных свойств тяжелых элементов.

Список литературы

- [1] Ramana M. V., Rajagopal A. K. // *Advances in chemical physics* / Ed. I. Prigogine, S. A. Rice. N. Y., 1983. V. LIV. P. 231—302.
- [2] McDonald A. H., Vosko S. H. // *J. Phys. C*. 1979. V. 12. N 11. P. 2977—2990.
- [3] Strange P., Staunton J., Gyorfyy B. R. // *J. Phys. C*. 1984. V. 17. N 15. P. 3355—3371.
- [4] Feder R., Rosicky F., Ackermann B. // *Z. Phys. B*. 1983. V. 52. N 1. P. 31—36.
- [5] Schadler G., Weinberger P., Boring A. M., Alberts R. C. // *Phys. Rev. B*. 1986. V. 34. N 2. P. 713—722.
- [6] Ackermann B., Feder R. // *J. Phys. C*. 1985. V. 18. N 5. P. 1093—1103.
- [7] Schadler G., Albers R. C., Boring A. M. // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 35. N 9. P. 4324—4330.
- [8] Cortona P., Doniach S., Sommers C. // *Phys. Rev. A*. 1985. V. 31. N 5. P. 2842—2850.
- [9] Andersen O. K. // *Phys. Rev. B*. 1985. V. 12. N 8. P. 3060—3083.
- [10] Brooks M. S. S., Kelly P. J. // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 51. N 18. P. 1708—1711.
- [11] Sticht J., Kubler J. // *Sol. St. Comm.* 1985. V. 54. N 5. P. 389—397.
- [12] Ebert H., Strange P., Gyorfyy B. L. // *J. Appl. Phys.* 1988. V. 63. N 8. P. 3052—3054.
- [13] Skriver H. L. *The LMTO method*. Berlin, 1984. 280 p.
- [14] Gunnarsson O., Jepsen O., Andersen O. K. // *Phys. Rev. B*. 1983. V. 27. N 12. P. 7144—7168.
- [15] Rose M. E. *Relativistic electron theory*. N. Y., 1961. 293 p.
- [16] Cracknell A. P. // *Phys. Rev. B*. 1970. V. 1. N 3. P. 1261—1263.
- [17] Barth U., Hedin L. // *J. Phys. C*. 1972. V. 5. N 8. P. 1629—1637.
- [18] Liechtenstein A. I., Katsnelson M. I., Antropov V. P., Gubanov V. A. // *J. Magn. Mater.* 1987. V. 67. N 3. P. 622—631.
- [19] Anisimov V. I., Antropov V. P., Liechtenstein A. I., Gubanov V. A., Postnikov A. V. // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 3. P. 1214—1220.
- [20] Singh M., Callaway J., Wang C. S. // *Phys. Rev. B*. 1976. V. 14. N 3. P. 1214—1220.
- [21] Szpunar B., Strange P. // *J. Phys. F*. 1985. V. 15. N 6. P. L165—L169.
- [22] Oles A., Kajzar F., Kucab M., Sikora W. *Magnetic Structure determined by neutron diffraction*. Warszawa, 1976. 727p.

Институт химии УрО АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
11 ноября 1988 г.