

Очевидно, одновременное сосуществование «магнитного» и «немагнитного» состояния атомов кобальта требует учета неоднородного распределения спиновой плотности гибридных $3d$ - и $5d$ -электронов [5].

Список литературы

- [1] Hirose S., Tsuchida T., Nakamura Y. // J. Phys. Soc. Jap. 1979. V. 47. N 3. P. 804—807.
- [2] Yoshie H. // J. Phys. Soc. Jap. 1978. V. 44. N 4. P. 1158—1161.
- [3] Taylor K. N. R., Christopher Y. T. // J. Phys. C. 1969. V. 2. P. N 12. 2237—2242.
- [4] Schwarz K., Mohn P. // J. Phys. F. 1985. V. 14. N 1. P. L129—L131.
- [5] Williams A. R., Zeller R., Moruzzi V. L., Gellat C. D., Kübler Y. // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. N 3. P. 2067—2070.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
4 марта 1989 г.
В окончательной редакции
1 июня 1989 г.

УДК 539.184.2

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 11, 1989

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА SrO

В. С. Степанюк, А. А. Григоренко, О. В. Фарберович,
А. А. Кацнельсон

Кристаллы щелочноземельных оксидов обладают высокой прочностью и оптической прозрачностью в инфракрасной и видимой областях спектра. Эти свойства обуславливают широкое применение этих кристаллов в тех-

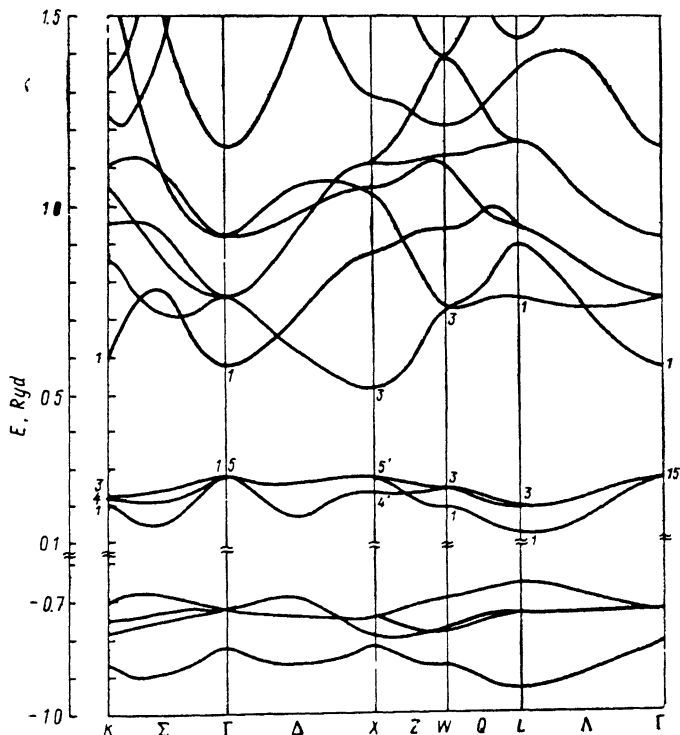


Рис. 1. Электронная зонная структура SrO .

нике, особенно в качестве оптически прозрачных покрытий. Ранее был предпринят цикл исследований электронной структуры соединений

A^{IVVI} [1-4]. В настоящей работе выполнен расчет электронной структуры и впервые теоретически определен спектр мнимой части функции диэлектрической проницаемости.

Оксид стронция обладает структурой типа NaCl с параметром решетки $a=5.156 \text{ \AA}$ [5]. Расчет зонной структуры проводился линейным методом присоединенных плоских волн [6], полностью самосогласованно, в рамках теории функционала электронной плотности [7]. Обменно-корреляционный потенциал рассчитывался в приближении локальной плотности. Зонная структура вычислялась в 89 точках неприводимой части первой зоны Бриллюэна. Самосогласование было достигнуто за 28 итераций с точностью не хуже 0.002 Ryd .

На рис. 1 представлена зонная структура SrO. В работе было получено, что нижняя валентная зона образована в основном p -состояниями Sr (80 % p -сост. Sr, 20 % s -сост. O). Верхняя валентная зона практически полностью образована p -состояниями O и имеет ширину 2.13 эВ. Анализ зонной картины показывает, что SrO — непрямозонный диэлектрик с непрямой щелью $E_g^{\Gamma-X}=3.39 \text{ эВ}$ (прямая щель в точках Γ и X равна соответственно 3.98 и 3.49 эВ). Дно зоны проводимости в SrO находится в точке X и образовано α -состояниями Sr. Эти результаты согласуются

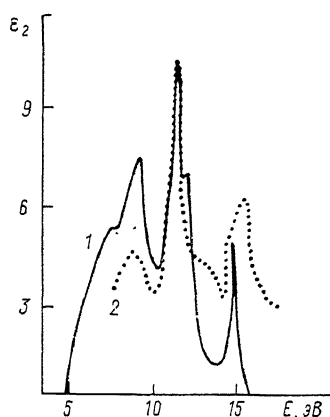


Рис. 2. Мнимая часть функции диэлектрической проницаемости SrO.

1 — расчет, 2 — эксперимент.

с единственной известной работой по электронной структуре SrO [2].

Надежных экспериментальных данных по электронной структуре оксида стронция в литературе нет. Однако в работе [8] было проведено экспериментальное исследование (с помощью синхротронного излучения) оптических свойств SrO, поэтому представлялись интересными расчет $\epsilon_2(\omega)$ и ее сравнение с экспериментом.

Рис. 2 иллюстрирует экспериментальную и теоретическую зависимости $\epsilon_2(\omega)$. Расчет проводился с учетом энергозависимости матричного элемента оптического перехода. Подробное влияние матричных элементов на спектр $\epsilon_2(\omega)$ исследовано нами ранее [4] и установлено, что их учет является принципиальным.

Вследствие того что локальное приближение теории функционала электронной плотности дает заниженное значение диэлектрической щели [9], расчетный спектр был совмещен с экспериментальным по положению основных пиков. Ранее было показано [4, 10], что такая процедура позволяет учесть поправки к собственным значениям, найденным в приближении локальной плотности.

Из рис. 2 можно видеть, что расчетный спектр в целом правильно передает основные особенности экспериментальной зависимости $\epsilon_2(\omega)$.

Список литературы

- [1] Эварестов Р. А., Котомин Е. А., Ермошкин А. Н. Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах. Рига: Зинатне, 1983.
- [2] Nasegawa A., Yanase A. // J. Phys. (C). Sol. St. Phys. 1980. V. 13. P. 1995—1999.
- [3] Степанова Е. В., Григоренко А. А., Степанюк В. С., Фарберович О. В., Кацнельсон А. А., Михайлин В. В. // Вестник МГУ. 1989. Т. 30. № 1. С. 61—63.
- [4] Степанов В. С., Григоренко А. А., Козлов А. В., Фарберович О. В., Михайлин В. В., Степанова Е. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 58—62.
- [5] Миркин Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу кристаллов. М., 1961.
- [6] Koelling D. D., Arbman G. O. // J. Phys. (F). 1975. V. 5. N 11. P. 2041—2054.

- [7] Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. (B). 1964. V. 136. N 3. P. 804—871.
 [8] Koneko K., Morimoto K., Koda T. // J. Phys. Soc. Jap. 1983. V. 52. N 12. P. 4385—4396.
 [9] Perdew J. P. // Int. J. Quant. Chem. 1986. V. 19. P. 497.
 [10] Hybersten M. S., Louie S. G. // Phys. Rev. (B). 1986. V. 34. N 8. P. 5390—5414.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
10 марта 1989 г.
В окончательной редакции
1 июня 1989 г.

УДК 548 : 537.611.44

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 11, 1989

СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ УПРУГИМИ ПОСТОЯННЫМИ И МЕЖАТОМНЫМИ СИЛОВЫМИ КОНСТАНТАМИ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ ХРОМОВЫХ ШПИНЕЛЕЙ

$M\text{Cr}_2\text{X}_4$ ($M = \text{Cd}, \text{Zn}, \text{Hg}; \text{X} = \text{S}, \text{Se}$)

Г. М. Квашин, О. П. Квашина

В настоящем сообщении представлены результаты расчета упругих постоянных соединений типа $M\text{Cr}_2\text{X}_4$ с использованием силовых констант, которые вычислены в работах [1, 2] из спектров инфракрасного и комбинационного рассеяния. В нашем расчете был использован метод сравнения упругой энергии с энергией деформированной решетки, выраженной через силовые константы f [3-5]. В отличие от работ [3-5] нами были учтены не только центральные, но и угловые силовые константы, что позволило более точно рассчитать упругие постоянные C_{12} и C_{44} . Расчет проводился в приближении ближайших соседей.

В соответствии с [1] в примитивной ромбоэдрической ячейке нормальной шпинели выделяем четыре локальные внутренние координаты с соответствующими им силовыми константами f_i ($i = 1, 2, 3, 4$), причем f_1 и f_3 соответствуют линейным $M-X$ и $\text{Cr}-X$ связям, а f_2 и f_4 угловым $X-M-X$ и $X-\text{Cr}-X$ связям.

Изменение длины связи между i и j атомами под действием внешних сил запишем следующим образом [6]:

$$\Delta r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} (r_{ij}, S_i - S_j), \quad (1)$$

где r_{ij} — расстояния между i и j атомами; S_i, S_j — смещения i и j атомов. Переходя к декартовым координатам, с учетом симметричной части тензора деформации получим

$$\Delta r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \sum_{\alpha, \beta} e_{\alpha\beta} (S_{\alpha i} - S_{\alpha j}) (S_{\beta i} - S_{\beta j}), \quad (2)$$

где $S_{\alpha i}, S_{\beta i}$ — декартовы координаты ($\alpha, \beta = x, y, z$) i -го атома ($i, j = 1, 2, \dots, 14$); $e_{\alpha\beta}$ — компоненты симметризованного тензора деформации. Аналогично получаем изменение угла между связями [6]

$$\Delta \varphi_{ijk} = \frac{1}{r_{ik}^2} \frac{1 - \cos \varphi_{ijk}}{\sin \varphi_{ijk}} \sum_{\alpha, \beta} e_{\alpha\beta} [(S_{\alpha i} - S_{\alpha k}) (S_{\beta i} - S_{\beta k}) + (S_{\alpha j} - S_{\alpha k}) (S_{\beta j} - S_{\beta k})] \quad (i, j, k = 1, 2, \dots, 14). \quad (3)$$

Потенциальная энергия деформированной элементарной ячейки U , выраженная через силовые константы и изменения внутренних локальных