

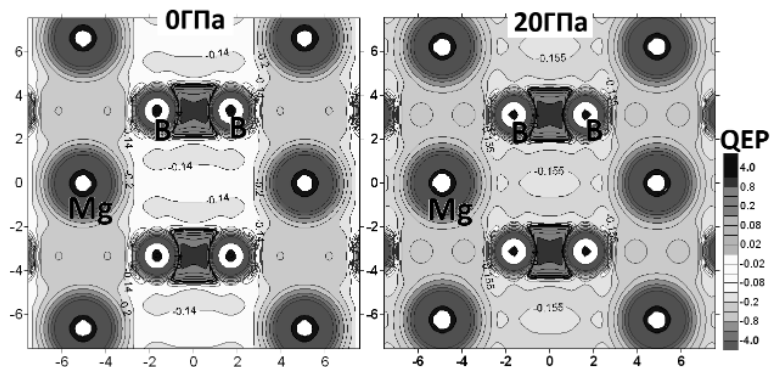
УПРУГИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ И КВАНТОВОЕ ЭЛЕКТРОННОЕ ДАВЛЕНИЕ: ПОИСК ВЗАИМОСВЯЗЕЙ

Матвейчук Ю.В.^а, Кропотина К.К.^а, Барташевич Е.В.^а, Цирельсон В.Г.^б

^аЮжно-Уральский государственный университет (НИУ), Челябинск, Россия

^бРоссийский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева, Москва, Россия

В задачах разработки новых кристаллических материалов немаловажную роль играют такие механические свойства, как прочность и возможная эластичность или пластичность кристаллов. Поэтому необходимо понимание структурных причин, ответственных за проявление таких свойств. Одним из определяющих факторов, влияющих на характеристики упругих модулей является пространственное распределение электронной плотности. В данной работе мы исследуем взаимосвязь анизотропии упругих модулей с пространственными характеристиками электронной плотности и локального квантового электронного давления, QEP [1] на примере кристалла диборида магния.



Для оценки упругого тензора кристалла MgB_2 выполнены расчёты с помощью CRYSTAL14 (PBE0/6-31G*/POB-TZVP). Проводилась полная оптимизация структуры с фиксированным объёмом кристаллической ячейки и контролем отсутствия мнимых частот. Для определения изменений в спектральных, механических и электронных характеристиках диборида магния под давлением были проведены оптимизация и расчёты уравнений состояния, а также упругих тензоров без давления и с приложением гидростатического давления 3 и 20 ГПа. Анализ показал уменьшение универсального индекса упругой анизотропии кристаллов от 1.00 до 0.63 с увеличением давления, что говорит о тенденции уменьшения разброса минимальных и максимальных значений упругих модулей при гидростатическом сжатии. Установлено, что направление минимального значения модуля Юнга несколько изменяется, но всегда ориентировано под углом к слою из атомов бора и близко к направлению связи Mg–B. Вполне закономерно, что направления максимума модуля Юнга и минимума линейной сжимаемости при любом давлении параллельны плоскости слоев. Угол между направлением максимума модуля Юнга и направлением связи B–B уменьшается с ростом давления. Максимальная линейная сжимаемость наблюдается в ортогональном слоем направлении, и её значение уменьшается с увеличением давления. Эти особенности связаны с деталями локального квантового давления электронов.

1. Tsirelson V.G., Stash A.I., Tokatly I.V. Bonding in molecular crystals from the local electronic pressure viewpoint, *Molecular Physics*, 2016

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, в рамках ГЗ 4.1157.2017/4.6 и гранта РФФИ 16-03-00057.