Анализ кристаллических и электронных структур в системе Y-Mn-O

Назаренко Александр Владимирович
студент
Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: kupri@phys.rsu.ru

В последние годы внимание исследователей привлечено к изучению проблемы сосуществования магнитных и сегнетоэлектрических свойств в системе Y-Mn-O в связи с перспективами применения мультифероиков в современных устройствах. К настоящему времени наиболее детально изучены структуры и физические свойства гексагональных высоко- и низкотемпературной модификации YMnO3, перовскитовая орторомбическая фаза YmnO3, орторомбическая фаза YMn2O3 и пирохлорная кубическая фаза Y2Mn2O7. Эти структуры отличаются друг от друга ближайшей координацией катионов, симметрией и параметрами атомов.

В настоящей работе проведено моделирование кристаллических и электронных структур составов системы Y-Mn-O. Расчеты проведены и использованием квантово-механического пакета CASTEP (Cambridge Sequental Total Energy Package), в котором реализован твердотельный метод функционала электронной плотности, основанный на базисе присоединенных плоских волн. Расчеты проводились в приближении нелокального учета обменно-корреляционной энергии. В качестве стартового приближения использовался атомный, так называемый, ультрамягкий псевдопотенциал. Базисный набор плоских волн был оборван на 240 эВ, что соответствует ошибке в вычислении полной энергии порядка $5*10^{-5}$, поэтому процедура самосогласования проводилась с точностью 10^{-5} эВ. Программа CASTEP позволяет автоматически находить равновесную кристаллическую конфигурацию, соответствующую минимальной полной энергии, с использованием процедуры Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno. Оптимизация геометрии проводилась до тех пор, пока атомное смещение не становилось меньше $5*10^{-4}$ А, а градиент по энергии не превышал 0,03 эВ/А.

Структура	R_{Mn-O}, A	R_{Y-O}, A	R_{Y-Y}, A	R_{O-O}, A	Q_{Mn}	Q_O	Q_Y	E_{tot}, eV	μ_{Mn}, μ_B
$YMnO_3$ $P6_3/mmc$	1,98-2,08	2,28	3,60	2,81	1,05	-0,85 - -1,04	1,85	-3009,94	7,99
$YMnO_3$ $P6_3cm$	1,97 – 2,06	2,25 – 2,29	3,57	2,71 – 2,85	0,93	-0,81 - -1,07	1,97	-3011,46	0,30
$YMnO_3$ Pnma	1,90 – 2,12	2,37	3,81	2,85 – 2,98	0,53 – 0,54	-0,85 – 0,88 -0,83 - -0,84	2,06	-3011,25	7,92
YMn_2O_5 Pbam	1,76 – 1,96	2,36 – 2,39	3,60 – 3,90	2,55-2,85	0,89	-0,57 - -0,85	2,05	*)	3,99

*) результаты уточняются