

Неэмпирический расчет раман-тензора кристаллов каломели.

Рогинский Евгений Михайлович¹, Марков Юрий Федорович¹, и Смирнов Борис Михайлович²

¹Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021, Россия (E-mail: e.roginskii@mail.ioffe.ru)

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 1990034, Россия

В работе теоретически изучены кристаллы каломели Hg_2Cl_2 , обладающие простой структурой, состоящей из параллельных оптической оси $C_4(Z)$ цепочек линейных молекул Cl-Hg-Hg-Cl , слабо связанных друг с другом, образующих объемно-центрированную тетрагональную решетку D_{4h}^{17} с двумя молекулами в элементарной ячейке. Эти кристаллы являются модельными при изучении структурных фазовых переходов.

В результате неэмпирических расчетов в рамках теории функционала зарядовой плотности (DFT) с представлением волновых функций электронов в базисе плоских волн были изучены фононный спектр и раман-тензор кристаллов Hg_2Cl_2 . В расчетах было использовано приближение обобщенных градиентов (GGA) и приближение локальной плотности (LDA). Однако расчеты с использованием LDA функционала не позволили получить хорошее согласие теории и эксперимента. Наилучший результат был получен с использованием градиентных поправок. Построение псевдопотенциалов было выполнено с учетом релятивистского эффекта в атомах Hg, в качестве основного состояния была выбрана конфигурация с частично обедненной 5d оболочкой. Проведено сравнение результатов этих расчетов с полуэмпирической моделью и экспериментом, выполненном ранее.

Работа поддержана программами РФФИ (грант 13-08-00930), президиума РАН П-20 и ОФН РАН.