

УДК 658.562:621

В.М. Сабадош¹, О.І. Чобаль¹, І.М. Різак², В.М. Різак¹

¹Ужгородський національний університет, Ужгород, вул. А. Волошина, 54
e-mail: rizak@univ.uzhgorod.ua.

²Національний аерокосмічний університет ім. Н.Е. Жуковського «ХАІ»

ПЕРШОПРИНЦИПНІ РОЗРАХУНКИ ФОНОННИХ СПЕКТРІВ КРИСТАЛІВ $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

У рамках теорії функціоналу густини розраховано із перших принципів просторову будову та фононні спектри для двох відомих структурних модифікацій кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$: сегнетоелектричної та параелектричної. Аналіз отриманих результатів свідчить про те, що в умовах оптимізації геометрії розглядувані структури залишаються стабільними, а розраховані частоти і симетрії фононних мод у центрі зони Бріллюена добре узгоджуються з наявними теоретичними та експериментальними даними, отриманими з комбінаційного розсіювання світла(КР) та інфрачервоних спектрів(ІЧ).

Ключові слова: фононні спектри, теорія функціоналу густини, псевдопотенціали.

Вступ

Вивчення динаміки ґратки та фазових переходів (ФП) є одним із напрямків фізики твердого тіла, що найбільш інтенсивно розвивається в останні десятиліття. Інтерес до даної проблематики зумовлений, перш за все, тим, що дослідження динамічної нестійкості кристалічної структури дають змогу отримати найбільше інформації про взаємодію між структурними одиницями твердого тіла. На особливу увагу заслуговують сегнетоелектричні ФП, при яких структурні зміни проявляються досить яскраво у виникненні спонтанної поляризації кристалічної структури. Через це дослідження динамічної структури кристалів типу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ є особливо актуальними.

Монокристал $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ є власним одновісним сегнетоелектриком. Дослідження оптичних, теплових і пружних властивостей, а також вивчення структури дозволили встановити, що кристал $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ при температурі $T_0 = 337$ К зазнає фазового переходу другого роду з вихідної параелектричної фази в сегнетоелектричну із зміною симетрії $P2_{1/c} \rightarrow P_c$. [1]

Завдяки високому значенню критеріїв піроелектричної якості, п'єзоелектричним та електромеханічним параметрам і можливості їх стабілізації кристал можна віднести до найбільш перспективних матеріалів для первинних піро- і п'єзоперетворювачів у широкому діапазоні температур.

Динамічні властивості кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ експериментально добре вивчені в серії робіт [2-7]. В [8-9] динаміка ґратки кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ була досліджена в рамках моделі жорстких іонів. Пізніше динаміка ґратки досліджуваних кристалів була переглянута в рамках квазігармонічної моделі з урахуванням всіх коливних мод [10].

В даній роботі вперше проведений розрахунок із перших принципів фононних спектрів кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ на основі теорії функціоналу густини, використовуючи релятивіські аналітичні псевдопотенціали Трульє-Мартінса [11] в наближенні локальної густини (LDA) з врахуванням обмінно-кореляційних поправок[12].

Методика розрахунку

Розрахунки просторової структури і

фононних спектрів досліджуваних кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ проведено в рамках теорії функціоналу густини [13] з використанням псевдопотенціального підходу в базисі плоских хвиль. Розрахунки здійснювалися за допомогою пакета програм ABINIT [14]. Ця програма використовує ефективний алгоритм швидкого перетворення Фур'є (для перетворення хвильових функцій між реальним та оберненим простором) [15], зонний метод спряженого градієнту [16] та алгоритм спряженого градієнту потенціала, що дозволяє визначити самоузгоджений потенціал [17], повну енергію та оптимізувати геометричну конфігурацію системи.

Для опису електронів атомного остову використано псевдопотенціали, розроблені Трулльє і Мартінсом [11]. Параметри ґратки і рівноважні положення атомів в елементарній комірці знаходились із умови мінімізації сил Гельмана-Фейнмана, що діють на атоми $<10^{-5}$ Ха/Бор, при самоузгодженому розрахунку повної енергії кристалу з точністю $< 10^{-10}$ Ха. При проведенні розрахунків особлива увага приділялась перевірці збіжності результатів по відношенню до вибору максимальної енергії плоских хвиль і щільності сітки хвильових векторів, що використовується при інтегруванні по зоні Бріллюена. Збіжність всіх обговорюваних далі величин досягались при максимальній енергії плоских хвиль 35 Ха і використанні сітки $6 \times 6 \times 6$, тобто нескінченний кристал замінювався циклічною системою із 214 примітивних комірок.

Оптимізація атомних координат і параметрів елементарної комірки була проведена з використанням методу BFGS [18] і продовжувалася до тих пір, поки сили, що діють на атоми не стали меншими за $2,5 \cdot 10^{-3}$ eВ/Å, а механічні напруги в комірці – меншими за $1,5 \cdot 10^{-3}$ ГПа.

Динаміка ґратки для кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ визначена з теорії DFPT (Density Functional Perturbation Theory) [19-22], згідно якої статичний лінійний відклик на фононні спотворення визначається виходячи з електронних властивостей основного стану. За допомогою теорії DFPT динамічні матриці можуть бути отримані в

будь-якій точці зони Бріллюена (ЗБ). За допомогою елементів симетрії просторових груп параелектричної фази ($P2_{1/c}$) та сегнетоелектричної (Pc) були обчислені динамічні матриці та фононні частоти в спеціальних точках $6 \times 6 \times 6$ ЗБ. Потім з використанням програми ANADDB (Analysis of Derivative DataBase) з пакету програм ABINIT шляхом Фур'є-перетворення були визначені міжатомні силові постійні в конфігураційному просторі. Нарешті, зробивши зворотне Фур'є-перетворення, було знайдено динамічну матрицю для будь-якого хвильового вектора в ЗБ а, отже, частоти для всіх фононів.

Результати та їх обговорення

Як відомо [23], елементарна комірка кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ в парафазі містить дві формульні одиниці. При пониженні температури кристал зазнає фазового переходу 2 роду із вихідної параелектричної фази в сегнетоелектричну. Виходячи з цього структурну оптимізацію геометрії проведено із дотриманням симетрії. В результаті пошуку рівноважної геометрії отримано дві стабільні конфігурації: сегнетофазу, повна енергія елементарної комірки якої $E = -182,5369 \text{ Ха}$ ($-4967,082 \text{ eВ}$) та парафазу $E = -182,5365 \text{ Ха}$ ($-4967,073 \text{ eВ}$). Як і передбачалося, менш симетрична низькотемпературна конфігурація кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ (сегнетофаза) є більш стійкою.

Порівняння основних розрахованих кристалографічних параметрів ґратки з відповідними експериментальними [24, 25] наведено в таблицях 1 і 2. Відхилення оптимізованих значень постійних ґратки для кожної із кристалічних модифікацій від експериментальних становить 3-6%. В таблиці 1 наведено координати тільки тих симетрично нееквівалентних атомів елементарної комірки, які займають позиції Уайкова з вільними параметрами. Координати інших атомів однозначно визначаються заданням просторової групи

симетрії та координат атомів зайнятих позицій Уайкова. Співставлення розрахованих та експериментальних [23, 24] значень дозволяє стверджувати, що розраховані відносні координати атомів в сегнето- та парафазах кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ добре узгоджуються з відповідними експериментальними даними (відхилення становить 2-5%).

Отримавши оптимізовану структуру кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ наступним кроком було обчислення фононних спектрів досліджуваних кристалів, використовуючи при цьому оптимізовані координати елементарної комірки кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$. Загальний вигляд незвідного представлення для оптичних нормальних коливань парафаз $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ має вигляд [26]:

$$\Gamma_{opt} = 15A_g^{(кр)} + 15B_g^{(кр)} + 14A_u^{(ик)} + 13B_u^{(ик)}.$$

Для центросиметричної структури парафаз $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ виконується правило альтернативної заборони, згідно якого парні відносно центру інверсії коливання (g) активні тільки в КР, а непарні коливання (u) – тільки в ІЧ спектрах. Для акустичних коливань парафаз: $\Gamma_{акуст.} = A_u + 2B_u$ (2). При переході в сегнетофазу із зміною просторової групи $P2_1/c \Rightarrow Pc$ коливання розділяються по симетрії тільки відносно площини ковзання – симетричні A' та антисиметричні A'' . Таким чином, незвідне представлення для оптичних коливань сегнетофаз $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ має вигляд [27]:

$$\Gamma_{opt.} = 28A'^{(кр,ик)} + 29A''^{(кр,ик)}.$$

Для акустичних коливань: $\Gamma_{акуст.} = 2A' + A''$ [27]. Проведений нами *ab initio* аналіз симетрії фононних мод за допомогою програми ANADDB приводить до ідентичних результатів (табл. 3, 4).

Аналіз фононних частот в центрі зони Бріллюена, проведений для сегнето

електричної фази [40], показує, що частотам вище 240 см^{-1} , відповідають високочастотні внутрішні коливання аніона $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$. Тоді як фононні моди нижче 240 см^{-1} можна розділити на три групи:

а) 12 мод нижче 90 см^{-1} , які пов'язані, перш за все із зміщеннями іонів Sn і $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$ групи. Деякі з них включають невелику кількість від вкладу $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$ обертань і $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$ обертальних деформацій.

б) 11 мод, що лежить між 90 і 140 см^{-1} , представлені в першу чергу вкладками від $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$ обертань з невеликим вкладом $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$ коливань і обертальних деформацій.

в) 10 мод, що лежить між 140 і 240 см^{-1} по своїй суті є $(\text{P}_2\text{S}_6)^{4-}$ коливаннями і обертальними деформаціями.

В таблицях 5 та 6 наведено порівняння експериментальних даних, отриманих з КР [28] та ІЧ [29] спектрів, наявних теоретичних [10], а також наших розрахунків значень фононних частот за типами симетрії (пара- та сегнетофаза). Як видно, з таблиць розраховані фононні частоти та експериментальні дані в цілому добре узгоджуються один з одним, і отриманий фононний спектр можна вважати достовірним. Розраховані частоти найбільш близькі до експериментальних в нижній і середній частині спектру (26 - 240 см^{-1}), тоді як для коливальних мод у верхній частині спектру спостерігається заниження до 20 см^{-1} в порівнянні з відповідними теоретичними і експериментальними результатами.

Тому питання про ступінь близькості отриманих нами результатів до експериментальним вимагає більш ретельного аналізу. Тим не менш, систематичне завищення або заниження фононних частот при розрахунках в рамках теорії функціонала густини раніше вже зазначалася і являється характерною особливістю розрахунків із перших принципів. Як показано в [30], причиною завищення фононних мод є використання наближення локальної густини (узагальненого градієнтного наближення) при описанні обмінно-кореляційної взаємодії.

Таблиця 1

Розраховані та експериментальні [23, 24] (наведено в дужках) значення відносних координат симетрійно нееквівалентних атомів

Фаза	атом	Координата		
		<i>x</i>	<i>y</i>	<i>Z</i>
парафаза (P2 _{1/c})	Sn1	0,4844 (0,4926)	0,3761 (0,3809)	0,7128 (0,7090)
	P1	0,6796 (0,6826)	0,8592 (0,8587)	0,8183 (0,8105)
	S1	0,4765 (0,4870)	0,7377 (0,7521)	0,8744 (0,8513)
	S2	0,7905 (0,7825)	0,9394 (0,9413)	0,9186 (0,0729)
	S3	0,6851 (0,6931)	0,6280 (0,0523)	0,5969 (0,5940)
сегнетофаза (Pc)	Sn1	0,0287 (0,0270)	0,6196 (0,6144)	0,2205 (0,2224)
	Sn2	0,0232 (0,0279)	0,1280 (0,1245)	0,7873 (0,7870)
	P1	0,1830 (0,1836)	0,1377 (0,1392)	0,3229 (0,3108)
	P2	0,3210 (0,3174)	0,3543 (0,3553)	0,1786 (0,1908)
	S1	0,4820 (0,4898)	0,7344 (0,7511)	0,8741 (0,8491)
	S2	0,2880 (0,2788)	0,0553 (0,0538)	0,5966 (0,5750)
	S3	0,1867 (0,1942)	0,9391 (0,9483)	0,0941 (0,0921)
	S4	0,0258 (0,0149)	0,7610 (0,7437)	0,6278 (0,6497)
	S5	0,2028 (0,2147)	0,4347 (0,4367)	0,9117 (0,9288)
	S6	0,3119 (0,3050)	0,5621 (0,5520)	0,3945 (0,4025)

Таблиця 2

Постійні елементарної комірки кристалів Sn₂P₂S₆ в пара- та сегнетофазі [24, 25]

	парафаза (P2 _{1/c})				сегнетофаза (Pc)			
	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	β°	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	β°
Розрахунок	8,777	7,200	6,254	91,405	8,808	7,248	6,246	91,345
Експеримент	9,318	7,463	6,517	91,088	9,378	7,488	6,513	91,155
Відхилення	-5,8%	-3,5%	-4,0	0,3%	-6,0%	-3,2%	-4,0%	0,2%

Таблиця 3

Аналіз нормальних коливань пара- фази $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ за допомогою програми ANADDB

$P_{2/c}$	E	C2	I	σ_h	n''
Ag	1	1	1	1	15
Bg	1	-1	1	-1	15
Au	1	1	-1	-1	14
Bu	1	-1	-1	1	13

Таблиця 4

Аналіз нормальних коливань сегнето- фази $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ за допомогою програми ANADDB

Pc	E	σ_h	n''
A'	1	1	28
A''	1	-1	29

Таблиця 5

Порівняння розрахованих теоретичних та експериментальних фононних спектрів в центрі зони Бріллюєна для кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ (сегнетофаза)

Ag			Bg			Au		Bu	
Наші	[10]	[28]	Наші	[10]	[28]	Наші	[10]	Наші	[28]
27,7	-	26	-	-	26?	43	49	12,17	35
40,99	39	35	50	43	41	58	57	-	58
	56	52	70	80	68	75	81	71	79
68	60	87	92	98	86	106	87	72	94
96	96	112	111	111	100	125	118	101	114
117	117	115	132	127	-	134	120	124	-
139	123	144	149	135	142	150	142	152	157
168	180	169	181	173	187	176	186	176	187
185	189	190	187	209	194	206	244	206	240
198	203	205	211	232	215	242	252	227	266
235	266	249	238	259	247	262	270	256	267
247	278	260	261	287	278	427	448	430	450
370	384	381	369	381	381	557	575	551	573
541	557	555	543	557	556	570	587	565	586
547	570	567	549	570	561				
558	581	-	566	586	580			-	

Таблиця 6

Порівняння розрахованих теоретичних та експериментальних фононних спектрів в центрі зони Бріллюена для кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ (парафаза)

A'			A''			A', A''
Наші	[10]	[28]	Наші	[10]	[28]	[29]
14			43,98	37	40	-
28	36	29	50,75	55	53	
41	41	33		56	59	
58	57	54	70	81	70	
58	58		75	82		
71	61	90	92	86	96	-
72	79	72	106	100	85	71
95	94	99	111	111	101	-
101	97	109	125	119	120	
116	114		132	121	127	
124	118	120	134	129	132	
139	125		150	136	144	
152	157		-	-	-	
168			149	142	138	
176	180	179	176	-	-	
185	185	-	181	173	185	
199	192	-	187	187	154	
206	204	204	207	210	194	-
227	242	219	211	245	215	217
235	266	-	238	252	-	247
-	267	245	242	259	248	
247	268	-	261	272	261	277
256	279	263	262	288	279	
370	385	381	369	380	381	
430	451	-	426	450	-	439
541	558	555	543	558	556	555
547	567	569	549	568	571	
551	574	578	557	575	-	571
558	582	586	566	587	582	
565	586	596	570	588	597	581

Висновки

Розраховані в процесі оптимізації геометрії значення постійних ґратки та координат атомів в пара- та сегнетофази кристалу практично відтворюють експериментальні результати. На основі результатів аналізу енергетичної стабільності

структурних модифікацій кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$, встановлено, що ацентрична конфігурація (сегнетоелектрична фаза) досліджуваної сполуки є більш стабільною.

Обчислені в центрі зони Бріллюена фононні частоти добре узгоджуються з експериментальними дослідженнями (КР

та ІЧ) в нижній і середній частині спектру. Виявлені заниження частот (до 20 cm^{-1}) для коливальних мод у верхній частині спектру у порівнянні з відповідними експериментальними результатами зумовлені

використанням наближення локальної густини (узагальненого градієнтного наближення) при описі обмінно-кореляційної взаємодії.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Семак Д.Г., Різак В.М., Різак І.М. Фото-, термоструктурні перетворення халькогенідів. Ужгород: Закарпаття, 1999. – 392 с.
2. Bokotei A.A., Vysochanskii Yu.M., Rizak V.M., Stefanovich V.A., Gurzan M.I., Ukr. Fiz. J., 1997, 42, No. 1, 62; Vysochanskii Yu.M., Slivka V.Yu., Voroshilov Yu.V., Gurzan M.I., Chepur D.V., Fiz. Tverd. Tela, 1979, 21, 215.
3. Ritus A.I., Roslick M.S., Vysochanskii Yu.M., Grabar A.A., Slivka V.Yu., Fiz. Tverd. Tela, 1985, 27, 2225 (in Russian).
4. Eijt S.W.H., Currat R., Lorenzo J.E., Saint-Gregoire P., Hennion B., Vysochanskii Yu.M., Eur. Phys. J. B, 1998, 5, 169.
5. Eijt S.W.H., Currat R., Lorenzo E.J., Saint-Gregoire P., Katano S., Janssen T., Hennion B., Vysochanskii Yu., J. Phys.: Condens. Matter., 1998, 10, 4811.
6. Valyavichus V.D., Samulionis V.I., Vysochanskii Yu.M., Fiz. Tverd. Tela, 1989, 31, 144 (in Russian).
7. Hlinka J., Gregora I., et al., Phys. Rev B, 2002, 65, No. 6, 9.
8. Grabar A.A., Vysochanskii Yu.M., Slivka V.Yu., Fiz. Tverd. Tela, 1984, 26, No. 10, 3093.
9. Rizak V.M., Grabar A.A., Vysochanskii Yu.M., Slivka V.Yu., Fiz. Tverd. Tela, 1989, 31, No. 7, 160.
10. Smirnov M.B., Hlinka J., Solov'ev A.V., Phys. Rev. B, 2000, 61, No. 22, 15059.
11. N. Troullier, L. Martins. Phys. Rev. B **43**, 1993 (1991).
12. Goedecker S., Teter M., Huetter J. Phys. Rev. B **54**, 1703 (1996).
13. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. – 1964. – V.136. – P. 864–871.
14. Gonze X., Beuken J.M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G.M., Sindic L., Verstraete M., Zerah G., Jallet F. Comput. Mater. Sci. **25**, 478 (2002).
15. Goedecker S. Fast radix 2, 3, 4 and 5 kernels for Fast Fourier Transformations on computers with overlapping multiply-add instructions // SIAM Journal on Scientific Computing. – 1997. – V.18. – P.1605 - 1610.
16. Payne M.C., Teter M.P., Allan D.C., Arias T.A., Joannopoulos J.D. Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients // Rev. Mod. Phys. – 1992. – V.64. – Issue 4. – P. 1045-1097.
17. Gonze X. First-principle responses of solids to atomic displacements and homogeneous electric fields: implementation of a conjugate-gradient algorithm // Phys. Rev B. – 1997. – V.55. – Issue 16. – P.10337–10354.
18. Schlegel H.B. Optimization of equilibrium geometries and transition structures // J. Comp. Chem. – 1982. – V.3. – Issue 2. – P. 214-218.
19. Gianozzi P., S. de Gironcoli, Pavone P., Baroni S. Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).
20. Baroni S., S. de Gironcoli, Dal Corso A., Gianozzi P. Rev. Mod. Phys. **73**, 515 (2001).
21. Gonze X. Phys.Rev. B **55**, 10337 (1997).
22. Gonze X., Lee C. Phys. Rev. B **55**, 10 355 (1997).
23. Ворошилов Ю.В., Сливка В.Ю. Аноксидные материалы для электронной техники. Львов. – 1989. – 200 с.
24. Dittmar G., Shafer H. Die Struktur des DiZinn-Hexathiodiphosphates $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ // Z. Naturforsch. – 1974. – V.29b. – № 5-6. – P. 312-317.
25. Ворошилов Ю.В., Поторий М.В., Сейковская Л.А. и др. Кристаллическая структура $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ // Кристаллография. – 1988. – Т.33. – Вып.5. – С. 1282-1283.
26. Fateley W.G., Mc Devitt N.T., Bentley F.F. Infrared and Raman selection rules for lattice vibrations: The correlation

method // Appl. Spectrosc. 1971. Vol. 25. N 2. P. 155-173.

27. Высочанский Ю.М., Сливка В.Ю., Ворошилов Ю.В. и др. Поляризационные спектры комбинационного рассеяния сегнетополупроводника // Физика твердого тела. 1979. Т. 21. № 1. С. 211-215.

28. Vysochanskii Yu. M., Slivka V.Yu., Voroshilov Yu. V., Gurzan M.I. and Chepur,

Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) 21, 211 (1979) [Sov. Phys. Solid State 21, 123 (1979)].

29. Perez-Mato J.M., Aroyo M., Hlinka J., Quilichini M. and Currat R., Phys. Rev. Lett. 81, 2462 (1998).

30. Goedecker S. Fast radix 2, 3, 4 and 5 kernels for Fast Fourier Transformations on computers with overlapping multiply-add instructions // SIAM Journal on Scientific Computing. – 1997. – V.18. – P. 1605-1610.

Стаття надійшла до редакції 10.02.2012

V.M. Sabadosh¹, O.I. Chobal¹, I.M. Rizak², V.M. Rizak¹

¹Uzhhorod National University, Uzhhorod, Voloshin Str., 54, Ukraine

²National Aerospace University, Kharkiv Aviation Institute, Kharkiv, Ukraine

THE FIRST PRINCIPLE CALCULATION OF PHONON SPECTRA OF THE CRYSTALS $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

The spatial and phonon spectra of two well-known modifications of crystalline $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ with different symmetries are calculated in the framework of the density-functional theory (DFT). The results obtained testify that in conditions of geometry optimization the considered structures are stable and calculated frequency with phonon modes symmetry in the center of the Brillouin zone are in good agreements with available theoretical and experimental data obtained from Raman and infrared spectra.

Key words: phonon spectra, density functional theory, pseudopotential.

В.М. Сабадос¹, А.И. Чобаль¹, И.М. Ризак², В.М. Ризак¹

¹Ужгородский национальный университет, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина

²Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского „ХАИ”, Харьков

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

На основе теории функционала плотности представлены результаты расчетов из первых принципов пространственного строения и фоновых спектров для двух известных структурных модификаций кристалла $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$: сегнетофазы и парафазы. Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что в условиях оптимизации геометрии, рассматриваемые структуры остаются стабильными, а рассчитанные частоты и симметрии фоновых мод в центре зоны Бриллюэна удовлетворительно согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными, полученными из комбинационного рассеяния света и инфракрасных спектров.

Ключевые слова: фоновые спектры, теория функционала плотности, псевдопотенциал.