

ВИВЧЕННЯ ТОЧНОСТІ ПЕРШОПРИНЦИПНИХ РОЗРАХУНКІВ ВЛАСТИВОСТЕЙ ХАЛЬКОГЕНІДІВ ЛУЖНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

Поживатенко В.В., канд. фіз.-мат. наук,

e-mail: pozhivatenko@ukr.net

Миколаївський національний аграрний університет

Анотація. Проведено першопринципні розрахунки структурних властивостей та характеристик фазових перетворень халькогенідів лужноземельних металів.

Ключові слова: оксиди, сульфіді, селеніди, телуриди лужноземельних металів, параметри рівняння стану, фазові переходи під тиском.

Широко відомі важливі механічні властивості халькогенідів лужноземельних металів приводять до їхнього використання в різноманітних пристроях, але ще більш важливі прикладення мають їхні оптичні властивості. Так склалося, що сульфіді, селеніди та, деякою мірою, телуриди лужноземельних металів вже кілька десятиріч використовуються в різних пристроях завдяки своїм люмінесцентним, фотолюмінесцентним, катодолюмінесцентним властивостям, але нарешті настав час для використання оптичних властивостей оксидів, які довгий час вважалися не такими перспективними в оптичних прикладеннях. Це відбувається завдяки використанню оксидів лужноземельних металів в індустрії дисплеїв. Мова йде про плазмені панелі та рідкокристалічні дисплеї, а саме про тонкі плівки для покриття цих пристроїв відповідними захисними шарами. Враховуючи різноманітні застосування механічних, електричних, магнітних, оптичних та інших властивостей халькогенідів лужноземельних металів в механічних та оптичних пристроях та їхній вплив на сучасні технології дослідники широко вивчають ці властивості, у тому числі за допомогою першопринципних розрахунків їхніх характеристик.

В роботі розглянуто точність розрахунків, що притаманна першопринципному підходу при обчисленні кристалічних характеристик халькогенідів лужноземельних металів. Відмітимо, що всі вивчаємі сполуки кристалізуються при $p = 0$ в структурі $B1$, яка має кубічну сингонію та майже всі (крім оксиду барію) зазнають перехід при підвищенні тиску в структуру $B2$, яка теж має кубічну сингонію, що значно скорочує обчислення.

Відповідні характеристики, а саме, постійна ґратки: a , об'ємний модуль B_0 , та його перша похідна по тиску B'_0 , тиск фазового перетворення p_t вже визначалися в експериментах і наведені в таблиці.

Таблиця. Експериментальні значення

Сполука	a , Å	B_0 , ГПа	B_0'	p_t , ГПа
CaO	4,810 [6]	111,2 [15]	4,2 [15]	61 [15]
CaS	5,689 [7]	57 [16]	4,8 [16]	40 [7]
CaSe	5,916 [7]	51 [7]	4,2 [7]	38 [7]
CaTe	6,348 [7]	41,8 [7]	4,3 [7]	33 [7]
SrO	5,160 [8]	91,3 [17]	4,3 [17]	36 [20]
SrS	6,024 [9]	58 [9]	4,0 [9]	18 [9]
SrSe	6,234 [10]	45,2 [10]	4,5 [10]	14 [10]
SrTe	6,659 [11]	39,5 [11]	5,0 [11]	12 [11]
BaO	5,523 [7]	72 [18]	5,0 [18]	-
BaS	6,387 [12]	39,42 [12]	4,0 [12]	6,5 [12]
BaSe	6,595 [13]	43,4 [13]	4,0 [13]	6 [13]
BaTe	7,007 [14]	29,4 [19]	4,0 [19]	4,8 [14]

Для проведення обчислень використовувався пакет QUANTUM ESPRESSO [1], причому вивчались два типи псевдопотенціалів: ультрам'який Вандербільта [2] і зберігаючий норму Мартінса – Труаліє [3], а також два способи врахування обмінно-кореляційних ефектів в методі функціоналу густини: наближення локальної густини [4] і узагальнене градієнтне наближення [5]. В розрахунках використано три схеми, які відповідно позначаються: 'pbe-van' для схеми, що враховує узагальнене градієнтне наближення і використовує псевдопотенціал Вандербільта, 'pbe-mt' для схеми, що враховує узагальнене градієнтне наближення і використовує псевдопотенціал Мартінса – Труаліє, 'pz-mt' для схеми, що використовує наближення локальної густини і псевдопотенціал Мартінса – Труаліє.

Результати розрахунків відображено на рисунку, де вони представлені у відношенні до експериментальних даних, що наведені в таблиці. З рисунку легко побачити, що найвища точність відтворення структурних експериментальних даних спостерігається при визначенні постійних ґраток. При цьому помітна перевага ультрам'якого псевдопотенціалу Вандербільта, що не так просто вже помітити при визначенні інших структурних величини, які до того ж визначаються значно менш точно в першопринципних розрахунках. Відмітимо, що у порівнянні з розрахунками для відповідних лужноземельних металів, де тиски фазових перетворень під тиском не відзначаються високою точністю, для діелектричних халькогенідів лужноземельних металів результати знаходяться в розумній згоді з експериментом. При цьому знов спостерігається найкраща точність результатів, що одержані з використанням псевдопотенціалу Вандербільта. До того ж відмітимо більшу точність результатів розрахунків з використанням узагальненого градієнтного наближення, ніж розрахунків з використанням наближення локальної густини.

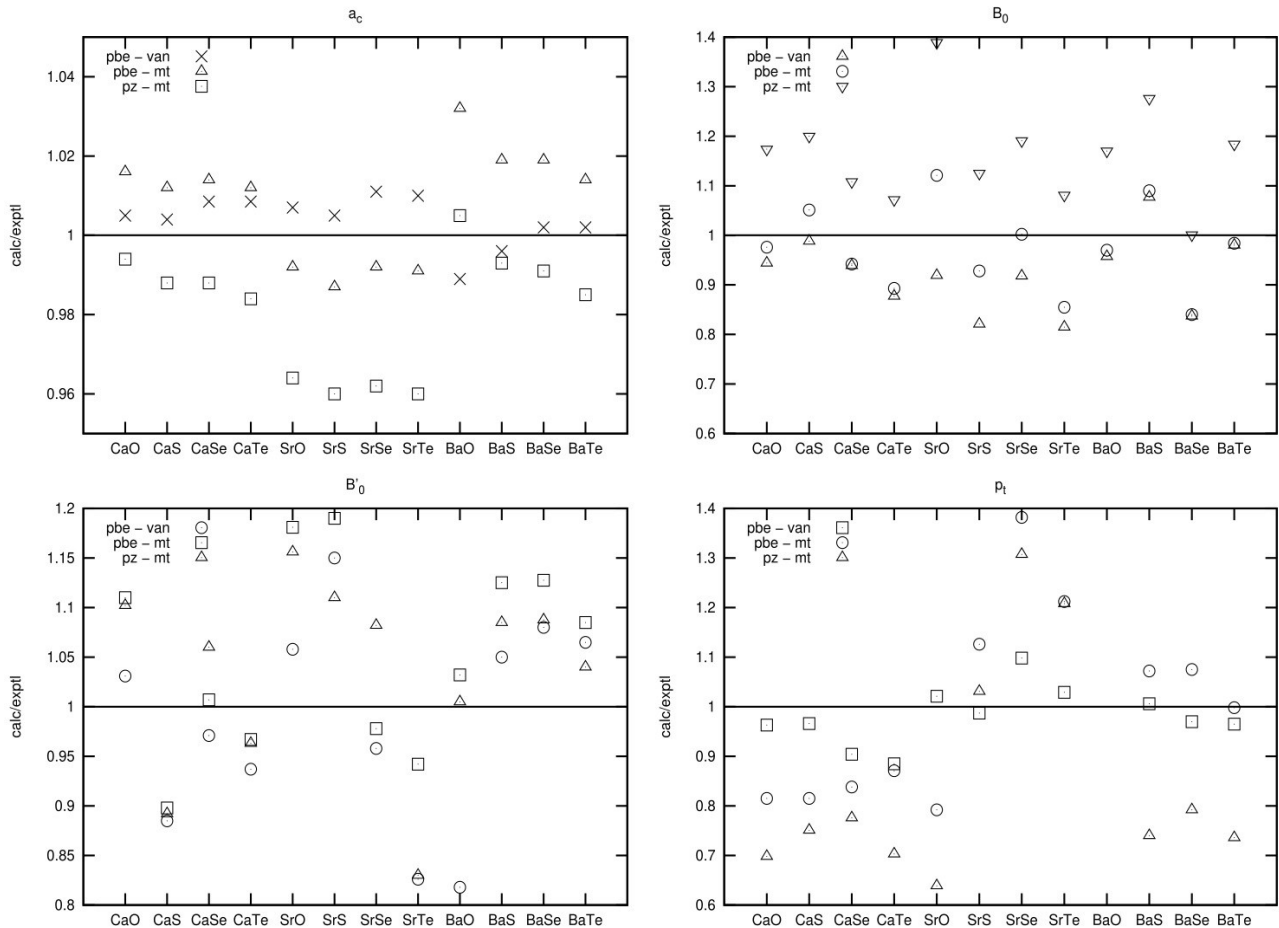


Рисунок. Відхилення розрахункових значень від експериментальних

Список використаних джерел:

1. Giannozzi, P., Baroni, S., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., ..., Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys.: Condens. Matter*, 21 (39), 395502. doi: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.
2. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Phys. Rev. B*, 41 (11), 7892 – 7895. doi: 10.1103/PhysRevB.41.7892.
3. Troullier, N., & Martins, J.L. (1991). Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. *Phys. Rev. B*, 43 (3), 1993 – 2006. doi: 10.1103/PhysRevB.43.1993.
4. Perdew, J.P., & Zunger, A. (1981). Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Phys. Rev. B*, 23 (10), 5048 – 5079. doi: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
5. Perdew, J.P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77 (18), 3865 – 3868. doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
6. Wyckoff, R.W.G. (1963). *Crystal Structures*. John Wiley.
7. Luo, H., Greene, R.G., Ghandehari, K., Li, T., & Ruoff, A.L. (1990). *Phys. Rev. B*, 50 (22), 16232 – 16237. doi: 10.1103/PhysRevB.50.16232.
8. Hellwege, K.H., & Hellwege, A.M. (Eds.). (1975). *Numerical Data and Functional Relationships and Technology Landolt – Börnstein Tables, Group III, Vol. 7b1 – Key Element O*. Springer.
9. Syassen, K. (1985). Pressure-Induced Structural Transition in SrS. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 91 (1), 11 – 15. doi: 10.1002/pssa.2210910102.

10. Luo, H., Greene, R.G., & Ruoff, A.L. (1994). High-pressure phase transformation and the equation of state of SrSe. *Phys. Rev. B*, 49 (21), 15341 – 15343. doi: 10.1103/PhysRevB.49.15341.
11. Zimmer, H.G., Winzen, H., & Syassen, K. (1985). High-pressure phase transitions in CaTe and SrTe. *Phys. Rev. B*, 32 (6), 4066 – 4070. doi: 10.1103/PhysRevB.32.4066.
12. Yamaoka, S., Shimomura, O., Nakazawa, H., & Fukunaga, O. (1980). Pressure-induced phase transformation in BaS. *Solid State Commun.*, 33 (1), 87 – 89. doi: 10.1016/0038-1098(80)90702-4.
13. Grzybowski, T.A., & Ruoff, A.L. (1983). High-pressure phase transition in BaSe. *Phys. Rev. B*, 27 (10), 6502 – 6503. doi: 10.1103/PhysRevB.27.6502.
14. Grzybowski, T.A., & Ruoff, A.L. (1984). Band-Overlap Metallization of BaTe. *Phys. Rev. Lett.*, 53 (5), 489 – 492. doi: 10.1103/PhysRevLett.53.489.
15. Richet, P., Mao, H.-K., & Bell, P.M. (1988). Static compression and equation of state of CaO to 1.35 Mbar. *J. Geophys Res. B*, 93 (12), 15279 – 15288. doi: **Ошибка! Недопустимый объект гиперссылки.**
16. Schlosser, H., & Ferrante, J. (1993). High-pressure equation of state for partially ionic solids. *Phys. Rev. B*, 48 (9), 6646 – 6649. doi: 10.1103/PhysRevB.48.6646.
17. Liu, L., & Bassett, W.A. (1973). Changes of the crystal structure and the lattice parameter of SrO at high pressure. *J. Geophys Res. B*, 78 (35), 8470 – 8473. doi: 10.1029/JB078i035p08470.
18. Liu, L., & Bassett, W.A. (1972). Effect of pressure on the crystal structure and the lattice parameters of BaO. *J. Geophys Res. B*, 77 (26), 4934 – 4937. doi: 10.1029/JB077i026p04934.
19. Ruoff, A.L., & Grzybowski, T.A. (1985). *Solid State Physics Under Pressure*. (S. Minomura, Ed.). Terra Scientific.
20. Sato, Y., & Jeanloz, R. (1981). Phase transition in SrO. *J. Geophys Res. B*, 86 (12), 11773 – 11778. doi: 10.1029/JB086iB12p11773.

Анотація: *The first-principle calculations of the structural properties and characteristics of phase transitions of alkaline earth chalcogenides were performed.*

Ключові слова: *oxides, sulfides, selenides, tellurides of alkaline earth metals, parameters of the equation of state, phase transitions under pressure.*

УДК 631.1:332.3

DOI 10.31521/978-617-7149-78-0-40

ПЕРЕВАГИ РОЗШИРЕННЯ ЕКОЛОГІЧНО БЕЗПЕЧНОГО ВИРОБНИЦТВА В АГРАРНОМУ СЕКТОРІ

Сіренко Н.М., д-р екон. наук, професор

e-mail: sirenko@mnaui.edu.ua

Мікуляк К. А., асистент

e-mail: mikulyak@mnaui.edu.ua

Миколаївський національний аграрний університет

Анотація. Розглянуто особливості екологічно безпечного виробництва як прикладу відповідального ставлення до навколишнього середовища; наведено переваги розширення екологічно безпечного виробництва в аграрному секторі.

Ключові слова: аграрний сектор; екологічно безпечне виробництво; органічне сільське господарство.