

Оценки констант сверхтонкого взаимодействия и распределение спиновой плотности в области ядер меди в кубаните

© Погорельцев^{1*} Александр Ильич, Матухин^{1*} Вадим Леонидович,
Корзун² Борис Васильевич и Гавриленко¹⁺ Андрей Николаевич

¹ Кафедра физики. Казанский государственный энергетический университет. ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (917) 930-42-46. E-mail: ang_2000@mail.ru

² ГНПО “Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению”. ул. П. Бровки, 19. г. Минск, 220072. Республика Беларусь. E-mail: korzun@physics.by

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: резонансная спектроскопия, ЯМР во внутреннем магнитном поле, градиент электрического поля (ГЭП), квадрупольные параметры, *ab initio* расчеты электронной структуры, распределение электронной плотности, сверхтонкие взаимодействия, распределение спиновой плотности.

Аннотация

Экспериментально изучены резонансные спектры ЯМР $^{63,65}\text{Cu}$ в локальном поле и с использованием кластерного подхода выполнены *ab initio* оценки градиента электрического поля на ядрах меди в кубаните CuFe_2S_3 . Расчеты проведены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри-Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF). Наибольший кластер, для которого проводили расчеты, имел формулу $\text{Cu}_7\text{Fe}_{14}\text{S}_{29}^n$ ($R \sim 6\text{Å}$, 50 атомов), где n -заряд кластера. Наилучшее совпадение значений квадрупольных параметров (квадрупольной частоты ν_Q и параметра асимметрии тензора градиента электрического поля η), определенных экспериментально ($\nu_Q \approx 7.3$ МГц, $\eta = 0.82$) и расчетным путем ($\nu_Q \sim 7.38$ МГц и $\eta \sim 0.87$), получено для кластера $\text{Cu}_7\text{Fe}_{14}\text{S}_{29}^{10}$, для которого построены карты распределения электронной и спиновой плотности в области квадрупольного ядра меди и выполнены оценки констант сверхтонкого взаимодействия. На основе анализа полученного распределения электронной плотности предположено, что связь в кубаните не является ковалентной. Диаграмма энергетических уровней, рассчитанная в приближении ROHF, достаточно хорошо определяет кубанит как полупроводник с очень узкой щелью LUMO–HOMO и соответствует представлению о кубаните как полупроводнике.