программного пакета QUANTUM ESPRESSO. В основе лежит метод псевдопотенциала с использованием плоских волн в рамках теории функционала плотности (DFT). Влияние остовных электронов учитывалось путем использования ультрамягких пседопотенциалов. Использован нелокальный обменно-корреляционный функционал в параметризации PerdewBurke-Ernzerhof (PBE, PBEsol). Энергия обрезания плоских волн для самосогласованного расчета составляла 40 эВ. Для интегрирования линейной зоны Бриллюэна (ЗБ) была использована сетка 8x8x1 в обратном пространстве.

ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ $Sr_3Ir_2O_7$ ОТ ДАВЛЕНИЯ

Андреев С.Н.*, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.

*E-mail: s.n.andreev@urfu.ru

DEPENDENCE OF THE ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF $Sr_3Ir_2O_7$ ON THE PRESSURE

Andreev S.N.*, Mazurenko V.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is devoted to the investigation of the crystal structure, electronic and magnetic properties of $Sr_3Ir_2O_7$ for ambient pressure phase and hight pressure phase. In order to solve this problem the first-principles calculations were used. Having calculated an equilibrium atomic structure we analyze the electronic excitation spectrum and band structure at different pressures. As a result the ground-state expectation value of the spin-orbit operator of the d-states, <LS> was calculated.

В последнее время возрастает интерес к соединениям иридия со структурой Раддлесдена-Поппера ($Sr_{n+1}Ir_nO_{3n+1}$), ярким их представителем является $Sr_3Ir_2O_7$. Недавно было показано, что сильное спин-орбитальное взаимодействие в оксидах, содержащих 5d элементы, может приводить к изоляторному состоянию с очень узкой энергетической щелью в электронном спектре [1]. Такое состояние может быть разрушено при помощи допирования или давления. Однако изменения в спектре электронных возбуждений под давлением остаются неизвестными. Целью проведенного исследования является теоретическое описание электронных и магнитных свойств $Sr_3Ir_2O_7$ при различном давлении.

На основании полученных результатов можно сказать, что при атмосферном давлении данное соединение является диэлектриком с шириной энергетической

щели 110 мэВ, а под давлением 20 ГПа происходит уширение энергетических зон и переход в металлическое состояние

В рамках настоящего исследования также были вычислены значения спин-орбитального оператора <LS> для d-состояний иридия при различном давлении. Для этого мы использовали матрицы заселенности, полученные методом DFT+U+SO, реализованным в пакете Quantum Espresso [2]. Полученное значение оператора <LS> для $Sr_3Ir_2O_7$, при атмосферном давлении меньше экспериментальных [3] и теоретических оценок [4] для Sr_2IrO_4. Однако это согласие улучшается с учетом вклада p состояний кислорода. Для соединения $Sr_3Ir_2O_7$ в зависимости от давления значения <L> <S> уменьшаются быстрее чем <LS>, что хорошо видно на рисунке.

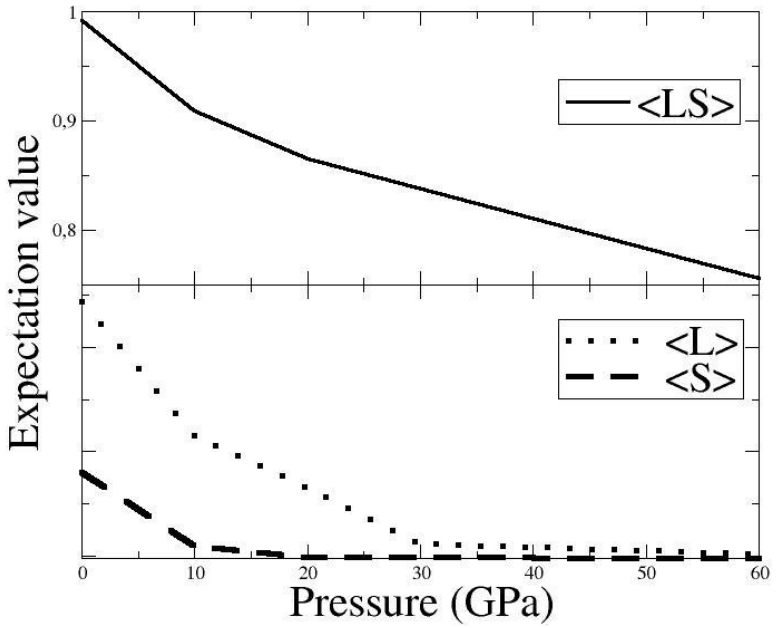

Рис. 1. Зависимость значений операторов <L> <S> в μB и <LS> для $Sr_3Ir_2O_7$ от давления.

1.Witczak-Krempa W., Chen G., et al., Rev. Condens. Matter Phys. 5, 57 (2014)
2. www.quntum-espresso.org.
3. D. Haskel, G. Fabbris, et al., Phys.Rev. Lett. 109, 027204 (2012)
4. Jae-Hoon Sim, Hongkee Yoon, et al., arXiv:1608.06388