

УПРУГИЕ СВОЙСТВА EuScCuSe_3 Чернышев В.А.¹, Григорьев М.В.², Остапчук Е.А.², Русейкина А.В.²¹УрФУ, Екатеринбург, Россия²ТюмГУ, Тюмень, Россияmaxgrigmv@yandex.ru

Ab initio расчеты упругих свойств соединения EuScCuSe_3 (пр. гр. *Стсн*) проведены впервые. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности с гибридным функционалом PBE0, учитывающим как локальный, так и нелокальный обмен в формализме Хартри-Фока. Расчеты были проведены в программе CRYSTAL17, предназначенной для моделирования периодических структур. Для описания внутренних оболочек европия по $4f$ включительно, был использован квазирелятивистский псевдопотенциал. Для описания внешних оболочек $5s^25p^6$, участвующих в химической связи, использовался валентный базисный набор TZVP типа. Для меди и скандия были использованы полноэлектронные базисные наборы. Был проведен расчет кристаллической структуры EuScCuSe_3 , затем расчет упругих постоянных (табл. 1).

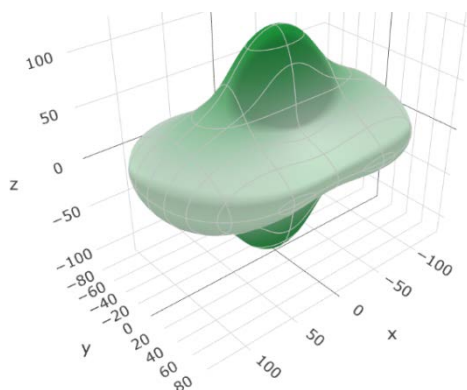
Таблица 1. Упругие постоянные, твердость по Виккерсу, ГПа

C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{22}	C_{23}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	H_V
151	43	27	98	37	128	13	33	45	4.83

Полученные из *ab initio* расчета упругие постоянные позволили вычислить модули упругости (табл. 2) и оценить твердость по Виккерсу H_V . Различие в оценках по Фойгту и Реуссу говорит об анизотропии упругих свойств, что также демонстрирует зависимость модуля Юнга от направления в кристалле EuScCuSe_3 (рис. 1).

Таблица 2. Объемный модуль, модуль сдвига, модуль Юнга и соотношение Пуассона

Схема расчета	Объемный модуль, ГПа	Модуль сдвига, ГПа	Модуль Юнга, ГПа	Соотношение Пуассона
Фойгта	65.5	36.1	91.5	0.267
Реусса	64.3	28.2	73.8	0.309
Хилла	64.9	32.2	82.9	0.287

Рис. 1. Зависимость модуля Юнга (ГПа) от направления в кристалле EuScCuSe_3 .

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Тюменской области по проекту Западно-Сибирского межрегионального научно-образовательного центра № 89-ДОН (3).