

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ СОЕДИНЕНИЙ FeAlO_3 И FeSiO_3

*Е. Д. Чернов, А. В. Лукоянов, В. И. Анисимов**

*Уральский федеральный университет
620002, Екатеринбург, Россия*

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 30 октября 2020 г.,
после переработки 30 октября 2020 г.
Принята к публикации 1 ноября 2020 г.

Изучаются свойства оксидных соединений железа FeAlO_3 и FeSiO_3 , которые встречаются в нижней мантии Земли. Выполнены расчеты электронной структуры соединений в рамках метода DFT+U на основе приближения обобщенной градиентной поправки с учетом электронных корреляций. Целью работы является исследование влияния электронных корреляций в $3d$ -оболочке ионов переходного металла железа на электронную структуру и магнитные свойства соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 . Рассмотрено формирование ферро- и антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов железа в FeAlO_3 и FeSiO_3 . Проведен сравнительный анализ параметров электронной структуры и магнитных характеристик, выявлены основные характеристики, такие как величины энергетической щели, магнитных моментов ионов, на которые влияет учет электронных корреляций. Проведено сравнение полученных теоретических результатов с опубликованными в научной литературе предыдущими результатами теоретических работ и известными экспериментальными данными.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040052

1. ВВЕДЕНИЕ

Соединение $\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{SiO}_3$ (минерал бриджманит) в нижней части земной мантии характеризуется невысоким содержанием железа, по данным различных исследований $x = 0.1\text{--}0.2$ [1]. Высокотемпературные эксперименты показывают, что бриджманит с концентрацией железа 28% стабилен при давлении 50 ГПа. Фазовая диаграмма [2] показывает стабильность соединения с содержанием железа 65% при 88 ГПа и температуре 1000 °С, а также с содержанием железа 50% при давлениях 85–108 ГПа и температуре 1800–2330 К. Данный минерал кристаллизуется в орторомбической искаженной структуре перовскита, за исключением самого нижнего тонкого слоя мантии, где он принимает структуру постперовскита. Понимание свойств бриджманита

осложнено не только искажениями структуры, но и изменениями химического состава, а также изменениями валентности ионов железа. Ионы магния в бриджманите Mg^{2+} занимают доэкаэдрические позиции *A*, а ионы кремния Si^{4+} занимают октаэдрические позиции *B*. Экспериментальные исследования содержащего алюминий бриджманита предполагают, что атомы алюминия появляются в решетке сразу в позициях *A* и *B*, замещая в них Mg и Si соответственно. Для замещения Mg на Fe^{3+} (*A*) и кремния на Al (*B*) наиболее энергетически выгодной является высокоспиновая конфигурация железа $S = 5/2$ во всем диапазоне условий нижней мантии Земли [3]. Нижняя мантия показана на схеме строения Земли на рис. 1.

Конечный член ряда железосодержащих соединений $(\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{SiO}_3$ для $x = 1$ — ферросилит FeSiO_3 , кристаллизуется в орторомбической *Pbca* и двух моноклинных *P2₁/c* и *C2/c* структурах. Кристалл ортоферросилита FeSiO_3 возможно получить синтетически при давлениях 1.8–4.5 ГПа

* E-mail: via@imp.uran.ru

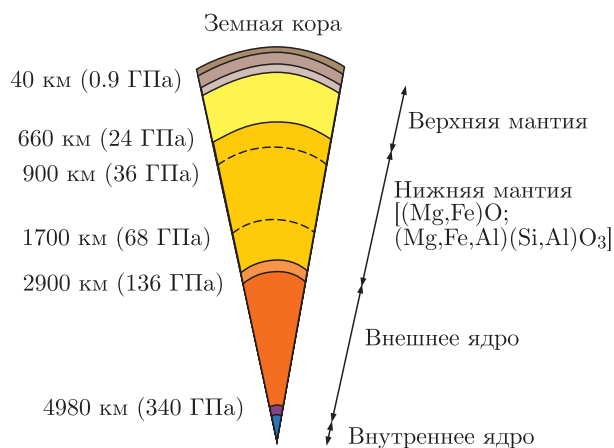


Рис. 1. (В цвете онлайн) Схема строения Земли

и температурах 1150–1400 °С. Имеющиеся теоретические исследования спиновых переходов в зависимости от давления в железосодержащем бриджманите [4], а также FeSiO₃ [5], проведенные в рамках теории функционала плотности (приближения LDA и GGA), дали довольно широкий диапазон давлений, необходимых для спинового перехода (77–1000 ГПа). Следует заметить, что значительная часть данного диапазона рассчитанных давлений переходов не характерна для нижней части мантии Земли (1000 ГПа и 284 ГПа [4, 5]). Теоретические исследования методом DFT+DMFT для моноклинной экспериментальной структуры, соответствующей высоким температурам и давлениям, предсказали наличие спинового перехода типа кроссовер ионов железа Fe²⁺ в диапазоне давлений 100–150 ГПа при 1200 К [6], а расчеты для более высоких температур предсказали недостижимость низкоспинового состояния в ионах железа Fe²⁺, что согласуется с экспериментальными данными для Fe²⁺ бриджманита. Вместе с тем для соединений железа FeAlO₃ и FeSiO₃ имеется достаточно мало экспериментальных и теоретических данных об электронной структуре и магнитных свойствах.

2. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для проведения расчетов электронной структуры соединений FeAlO₃ и FeSiO₃ был использован пакет компьютерных программ Quantum Espresso [7]. В расчетах волновые функции были разложены по плоским волнам для стандартных ультрамягких псевдопотенциалов из библиотеки Quantum Espresso. Обменно-корреляционный потенциал брался в приближении обобщенной градиентной по-

Таблица 1. Координаты атомов соединения FeAlO₃ в единицах постоянной решетки

Тип атома	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Fe1	0.185	0.1518	0.1533
Fe2	0.1731	0.4666	0.3688
Al1	0.1729	0.1528	0.5706
Al2	0.1845	0.84	0.3741
O1	0.4822	0.177	−0.0083
O2	0.0101	0.0089	0
O3	0.3419	−0.0019	0.2711
O4	0.3445	0.6629	0.2654
O5	0.3451	0.3317	0.2433
O6	0.0089	0.3273	0.5115

правки (GGA) версии Педью–Бурке–Эрнзенхофа (PBE) [8] и в методе DFT+U [9]. Интегрирование в обратном пространстве проводилось по сетке *k*-точек 8 × 8 × 8. Для достижения нужной сходимости по полной энергии при самосогласовании был выбран энергетический предел cutoff для плоских волн 60Ry.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ ДЛЯ FeAlO₃

Соединение FeAlO₃ кристаллизуется в орторомбической *Pna2*₁-структуре групп симметрии (номер 33 в списке кристаллографических групп). Параметры элементарной ячейки составляют *a* = 4.984 Å, *b* = 8.554 Å, *c* = 9.241 Å, α = β = γ = 90°. Координаты всех неэквивалентных атомов FeAlO₃ приведены в табл. 1. Координаты остальных атомов элементарной ячейки были получены путем учета симметрии соединения. Приведенные выше параметры решетки для соединения FeAlO₃ взяты из работы [10].

Графики полных и парциальных плотностей состояний (Density of states — DOS) представлены на рис. 2 в случае антиферромагнитного упорядочения. Для антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe наблюдается перераспределение электронных плотностей. Плотности состояний для проекций спинов «вверх» и «вниз» очень близки. В зоне проводимости можно отметить на-

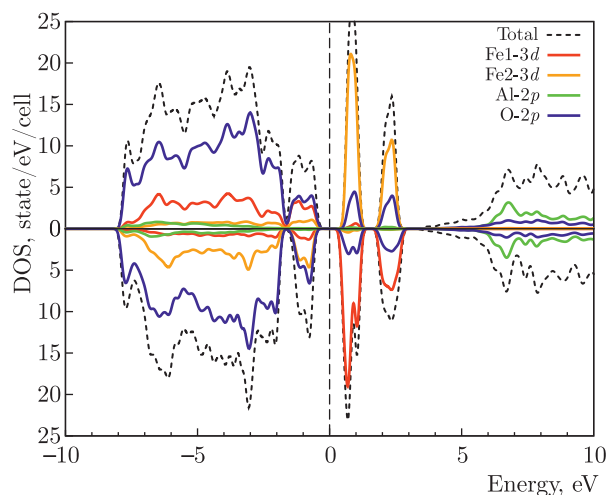


Рис. 2. (В цвете онлайн) Плотности электронных состояний FeAlO_3 в случае антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

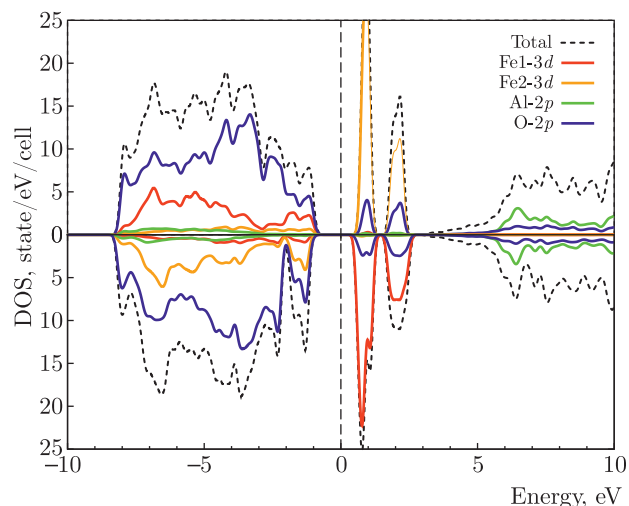


Рис. 3. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeAlO_3 при $U = 1$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

Таблица 2. Магнитные моменты отдельных ионов в соединении FeAlO_3 при ферромагнитном (ФМ) и антиферромагнитном (АФМ) упорядочениях магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.70	3.49
Fe2	3.68	-3.46
Al	0	0
O	0.09–0.39	-0.06–0.07

личие структуры из двух максимумов, локализованных при 1 эВ и 2.5 эВ, пики в основном сформированы $3d$ -электронами Fe, но также мы видим, что непосредственное участие в формировании пиков принимают $2p$ -электроны O. Стоит отметить, что максимумы в проекции спина «вверх» имеют большую интенсивность. В общем случае плотности электронных состояний для разных проекций спина имеют одинаковый характер.

В табл. 2 приведены значения магнитных моментов для соединения FeAlO_3 . Магнитный момент кислорода имеет величину между -0.06 и $0.39\mu_B$, величина магнитного момента для ионов алюминия составляет менее $0.01\mu_B$. Кроме того, из-за гибридизации p -орбиталей кислорода с d -орбиталями же-

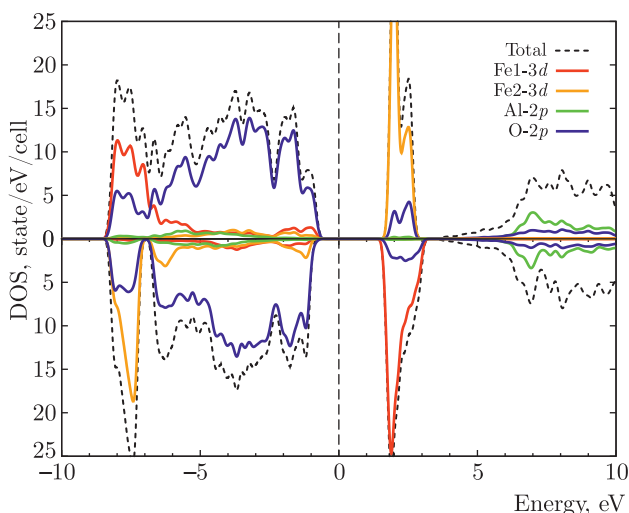


Рис. 4. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeAlO_3 при $U = 4$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

леза при изменении магнитного момента железа будет изменяться также магнитный момент кислорода. Полученные значения магнитных моментов для ионов O близки. Магнитные моменты ионов Fe достаточно близки. Но необходимо учесть сравнение полных энергий, которое приведено ниже и показало, что для FeAlO_3 более стабильным является антиферромагнитное упорядочение.

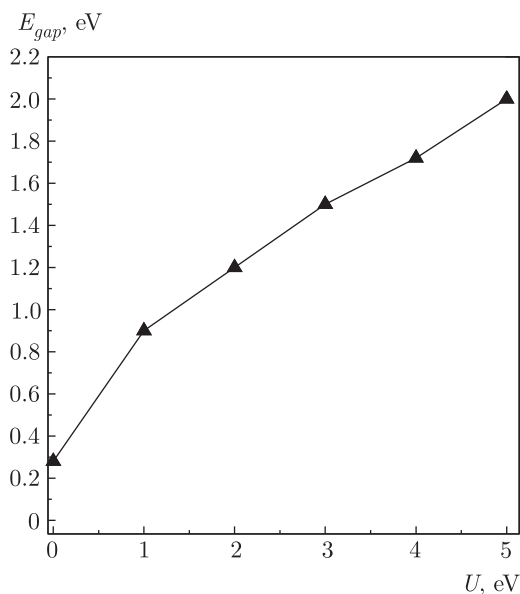


Рис. 5. Зависимость ширины энергетической щели соединения FeAlO_3 от параметра U в АФМ-случае

Как в случае расчетов при антиферромагнитном упорядочении магнитных моментов ионов Fe, видно, что электронная плотность состояний соединения FeAlO_3 характерна для диэлектрика с переносом заряда, данные представлены на рис. 3, 4. В случае $U = 1$ эВ (рис. 5) наблюдается значительное расширение энергетической щели и ее значение составляет 0.9 эВ. Перераспределение электронной плотности привело к исчезновению отдельного пика на краю валентной зоны в случае спина «вверх», к смещению двух максимумов в зоне проводимости по направлению друг к другу и их увеличению как для спина «вверх», так и для спина «вниз».

При увеличении параметра U в FeAlO_3 до 4 эВ наблюдается перераспределение плотности $3d$ -электронов Fe в сторону низких энергий валентной зоны. Наряду с перераспределением электронной плотности в валентной зоне, происходит перераспределение электронной плотности и в зоне проводимости, а именно, на ее краю два отдельных пика, образованные $3d$ -электронами Fe, начинают объединяться.

В ходе расчетов электронной структуры была обнаружена интересная особенность ионов Fe. Во всех расчетах электронной структуры FeAlO_3 электронная конфигурация ионов железа Fe^{2+} ($3d^6$), что видно по числу $d = 5.86$ электронов. Из полученных результатов, представленных на рис. 6 и 7, видно, что орбитали полностью заполнены состояниями с одной проекцией спина — «вверх». В случае

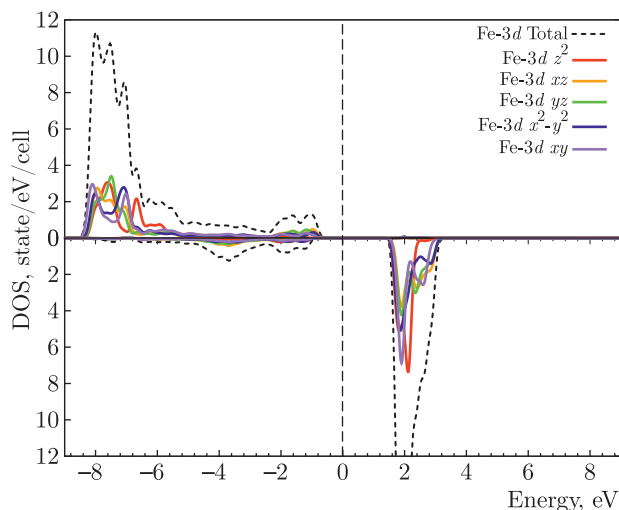


Рис. 6. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe1 в соединении FeAlO_3 при $U = 4$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

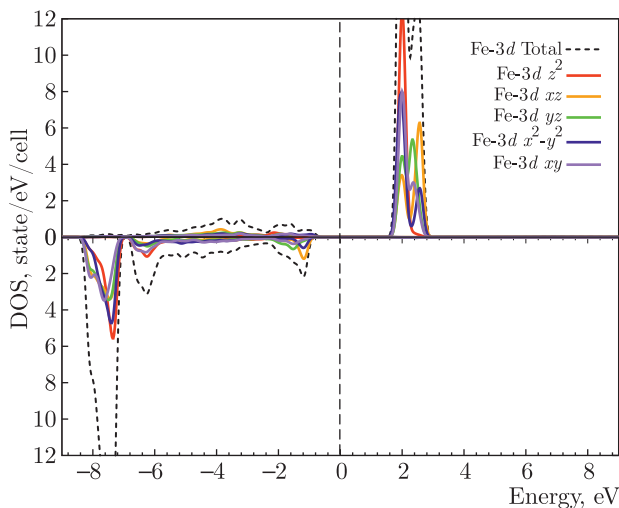


Рис. 7. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe2 в соединении FeAlO_3 при $U = 4$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

проекции спина «вверх» полная заселенность $3d$ -состояний иона Fe1 равна $4.96e$ (с орбитальными заселенностями 1.00, 0.99, 0.99, 0.99, 0.99e). Оставшиеся $0.84e$ в $3d$ -оболочке Fe1 заполняют состояния с проекцией спина «вниз», для всех $3d$ -орбиталей заселенности маленькие: 0.10, 0.20, 0.20, 0.17, 0.15e. Заселенности $3d$ -орбиталей иона Fe2 являются идентичными заселенностям $3d$ -орбиталей иона Fe1. Но

Таблица 3. Сравнение магнитных моментов отдельных ионов в соединении FeAlO₃ при $U = 1$ эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.87	3.73
Fe2	3.84	-3.70
Al	0	0
O	0.09-0.39	-0.07-0.06

Таблица 4. Сравнение магнитных моментов отдельных ионов в соединении FeAlO₃ при $U = 4$ эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.93	3.85
Fe2	3.91	-3.83
Al	0	0
O	0.07-0.33	-0.06-0.07

в силу АФМ-упорядочения заселенности для проекций спина «вверх» и «вниз» поменяются местами — заселенности для проекции спина «вниз» будут максимальными.

Значения магнитных моментов ионов в FeAlO₃, полученные в результате расчетов, представлены в табл. 3, 4. При сравнении полученных значений для ФМ- и АФМ-упорядочений видно, что в случае ФМ-упорядочения значения магнитных моментов ионов Fe больше, чем при АФМ-упорядочении, такая же тенденция наблюдается и для ионов O. Также для каждого из случаев упорядочения наблюдается тенденция увеличения магнитных моментов ионов Fe с увеличением параметра кулоновского взаимодействия. Для ионов O получился противоположный результат — в случае ФМ-упорядочения значения магнитных моментов уменьшаются, а в АФМ-случае остаются неизменными. Что касается ионов Al, то значения магнитных моментов также составляют менее чем $0.01\mu_B$ в ФМ- и АФМ-случаях упорядочения ионов Fe. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами предыдущего расчета: $3.69\mu_B$ [11], а также с результатами эксперимента: $3.4 \pm 0.2\mu_B$ [10].

Таблица 5. Значения полных энергий для FeAlO₃ в АФМ- и ФМ-упорядочениях магнитных моментов ионов Fe и их разности

Тип магнитн. упорядочения	U , эВ	E , Ry	ΔE , Ry
АФМ	0	-2900.3378	0
	1.0	-2896.6972	0
	2.0	-2896.3899	0
	3.0	-2896.1226	0
	4.0	-2895.8658	0
ФМ	0	-2900.0874	0.2504
	1.0	-2896.5299	0.1673
	2.0	-2896.2465	0.1434
	3.0	-2895.9967	0.1259
	4.0	-2895.7548	0.1110

В табл. 5 представлено сравнение полных энергий между ФМ- и АФМ-упорядочениями. Из полученных результатов видно, что более энергетически выгодным является АФМ-упорядочение.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ ДЛЯ FeSiO₃

Соединение FeSiO₃ в данной работе будем рассматривать в низкотемпературной моноклинной фазе $P2_1/c$ (номер 14 в списке кристаллографических групп). Параметры элементарной ячейки составляют: $a = 9.485 \text{ \AA}$, $b = 9.081 \text{ \AA}$, $c = 5.235 \text{ \AA}$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 103.207^\circ$. Координаты всех неэквивалентных атомов FeSiO₃ приведены в табл. 6. Координаты остальных атомов элементарной ячейки были получены путем учета симметрии соединения. Ячейка содержит 8 атомов железа (4 первого типа Fe1 и 4 второго типа Fe2), 8 атомов кремния (4 первого типа Si1 и 4 второго типа Si2) и 24 атома кислорода. Атом Fe первого типа имеет окружение из шести атомов O в форме октаэдра, второго типа — тетраэдра из O. Атомы Si обоих типов имеют окружение из четырех атомов O в форме тетраэдра. Приведенные выше конфигурации решетки для соединения FeSiO₃ были взяты из статьи [12].

Графики полных и парциальных плотностей состояний представлены на рис. 8 в случае ферромагнитного упорядочения в соединении FeSiO₃. В случае ферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe для спина «вверх» уровень Ферми

Таблица 6. Координаты атомов соединения FeSiO_3 (в единицах постоянной решетки)

Тип атома	x	y	z
Fe1	0.7512	0.3462	0.025
Fe2	0.2744	0.4855	0.4983
Si1	0.4546	0.3384	0.2461
Si2	0.0531	0.1666	0.31
O1	0.629	0.338	0.307
O2	0.121	0.663	0.258
O3	0.375	0.496	0.21
O4	0.133	0.019	0.246
O5	0.394	0.234	-0.009
O6	0.108	0.298	0.138

Таблица 7. Сравнение магнитных моментов отдельных ионов в соединении FeSiO_3 в ФМ- и АФМ-упорядочениях магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.47	3.42
Fe2	3.23	-3.20
Si	0	0
O	0.02–0.11	-0.02–0.05

$3d$ -электроны Fe. Стоит заметить, что пик находится в зоне проводимости, а это значит, что соединение способно пропускать ток, но только с одной проекцией — «вниз». Из этого следует, что соединение является полуметаллом.

В табл. 7 приведены значения магнитных моментов для соединения FeSiO_3 . Как и в случае с FeAlO_3 , можно ожидать, что магнитный момент кислорода будет иметь значение между 0.02 и 0.11 магнетонов Бора. Для ионов кремния величина магнитного момента составляет менее $0.01 \mu_B$. Значения магнитных моментов ионов Fe в случае ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочений близки между собой. Но необходимо учесть полные энергии, приведенные для сравнения в табл. 10. Сравнение показало, что для FeSiO_3 более стабильным является ФМ-упорядочение. Таким образом, для магнитных упорядочений с минимальной полной энергией, которые соответствуют основному состоянию в соединениях FeAlO_3 и FeSiO_3 , величины магнитных моментов достаточно близки.

В расчетах для соединения FeSiO_3 с учетом электронных корреляций в случае ферромагнитного упорядочения ионов Fe при разных параметрах U были получены различные характеры электронных плотностей. На рис. 9 для $U = 1$ эВ видно, что соединение FeSiO_3 проявляет свойства полуметалла и может пропускать ток только с проекцией спина «вниз». На краю зоны проводимости мы можем наблюдать два максимума, образованные $3d$ -электронами Fe, один из которых находится на уровне Ферми, другой — в интервале 0.5–2.5 эВ.

В дальнейшем при увеличении параметра кулоновского взаимодействия до 4 эВ (рис. 10) происходит раздвижка электронных состояний на уровне Ферми, в результате чего образуется энергетическая

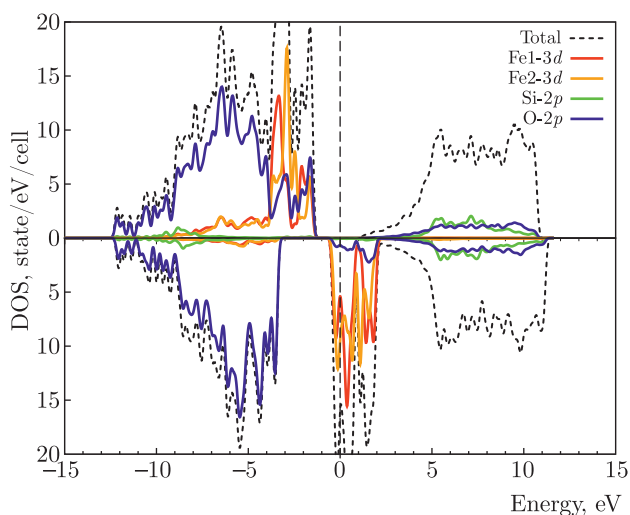


Рис. 8. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeSiO_3 в случае ФМ-упорядочения магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

расположен в энергетической щели, ширина которой составляет 1.5 эВ. В валентной зоне наблюдается пик плотности электронных состояний. Как видно из графика, основной вклад в верхнюю часть валентной зоны вносят $3d$ -электроны Fe. В случае спина «вниз», напротив, пик электронных состояний, который находится в зоне проводимости, приходится на уровень Ферми. Основной вклад в него вносят

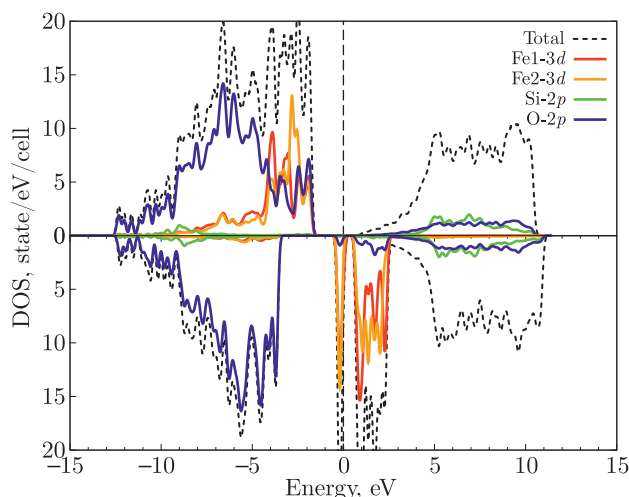


Рис. 9. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeSiO₃ при $U = 1$ эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

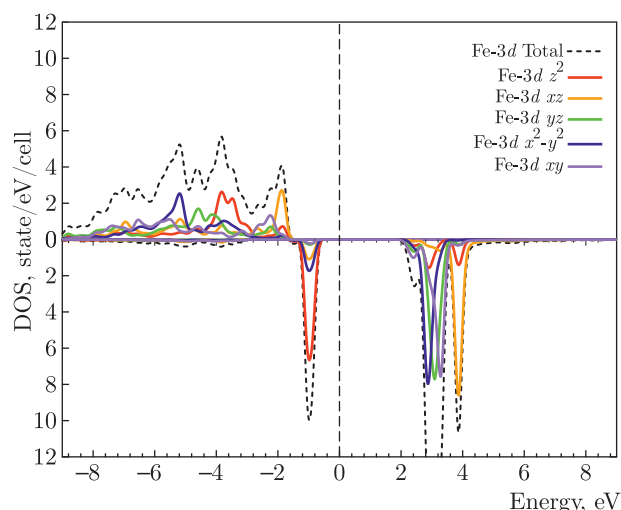


Рис. 11. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe1 в соединении FeSiO₃ при $U = 4$ эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

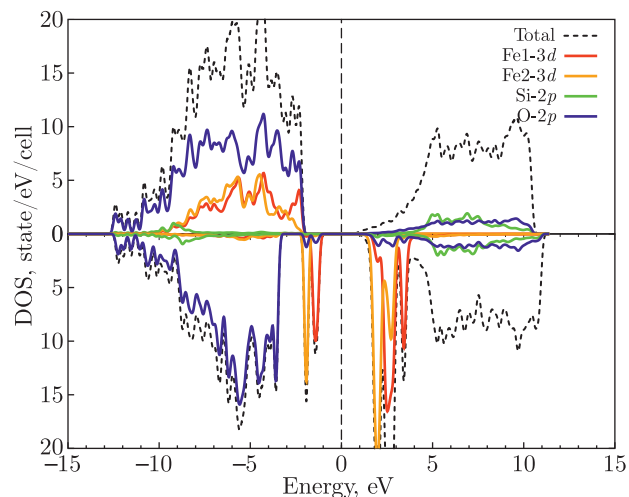


Рис. 10. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeSiO₃ при $U = 4$ эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

щель, и соединение начинает проявлять свойства изолятора.

Рассмотрим результаты расчетов в случае ферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe в FeSiO₃, представленные на рис. 9, 10. На нижних частях графиков, соответствующих проекции спина «вниз», есть два максимума, которые образованы 3d-электронами Fe1 и Fe2. Максимум, образованный 3d-электронами Fe1, находится на краю валентной зоны, а максимум, образованный

3d-электронами Fe2, — на краю зоны проводимости. Стоит заметить, что в случае проекции спина «вверх» максимумы находятся вблизи уровня Ферми, но на самом уровне находится энергетическая щель.

В случае расчетов для FeSiO₃ электронная конфигурация ионов железа такая же, как и в соединении FeAlO₃, но из-за более низкой симметрии моноклинной структуры вырождение уровней снимается, поэтому один электрон в проекции вниз садится полностью на одну орбиталь, хорошо отделенную еще в РВЕ-расчетах из-за моноклинной структуры. И остальные орбитали выше и ниже по энергии тоже хорошо отделены, что мы и видим на рис. 11 и 12. В случае проекции спина «вверх» полная заселенность 3d-состояний иона Fe1 равна 4.98e (с орбитальными заселенностями 1.00, 0.99, 1.00, 1.00, 0.99e). Оставшиеся 1.21e в 3d-оболочке Fe1 заполняют состояния с проекцией спина «вниз», главным образом относящиеся к 3d_{z²}-орбитали иона Fe1 с заселенностью 0.68e, для остальных 3d-орбиталей заселенности маленькие: 0.17, 0.07, 0.20, 0.09e. Заселенности 3d-состояний иона Fe2 полностью идентичны заселенностям 3d-состояний иона Fe1. С одинаковыми спиновыми направлениями в случае ФМ-упорядочения и противоположными в случае АФМ-упорядочения.

Значения магнитных моментов, полученные в результате расчетов, представлены в табл. 8, 9. При сравнении полученных значений для ФМ- и АФМ-упорядочений видно, что в случае ФМ-упо-

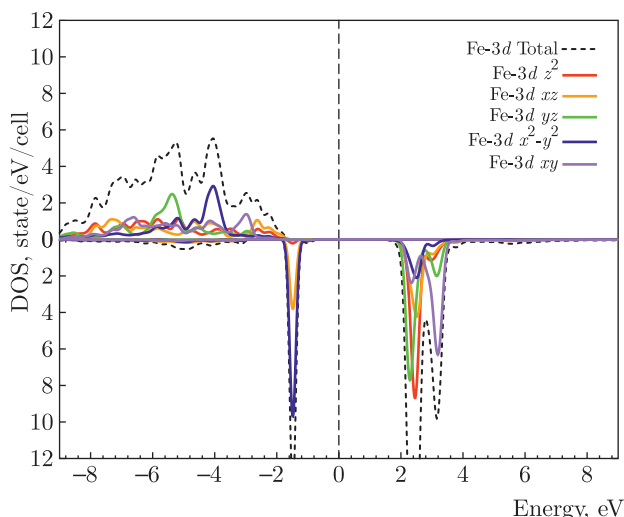


Рис. 12. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe2 в соединении FeSiO3 при U = 4 эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

Таблица 8. Сравнение магнитных моментов ионов в соединении FeSiO3 при U = 1 эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.54	3.45
Fe2	3.29	-3.33
Si	0	0
O	0.01-0.07	-0.01-0.02

Таблица 9. Сравнение магнитных моментов ионов в соединении FeSiO3 при U = 4 эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.50	3.49
Fe2	3.38	-3.38
Si	0	0
O	0.01-0.04	-0.01-0.01

Таблица 10. Сравнение полных энергий для FeSiO3 для ФМ- и АФМ-упорядочений магнитных моментов ионов Fe

Тип магнитн. упорядочения	U, эВ	E, Ry	ΔE, Ry
ФМ	0	-2876.8092	0
	1.0	-2873.1691	0
	2.0	-2872.9778	0
	3.0	-2872.8857	0
	4.0	-2872.7702	0
АФМ	0	-2876.7595	0.0497
	1.0	-2873.1517	0.0174
	2.0	-2873.0046	0.0268
	3.0	-2872.8821	0.0036
	4.0	-2872.7587	0.0115

рядочения значения магнитных моментов ионов Fe больше, чем при АФМ-упорядочении, такая же тенденция наблюдается и для ионов O, для ионов Si значения магнитных моментов составили менее 0.07μB. По мере увеличения параметра кулоновского взаимодействия магнитные моменты в ФМ-случае остаются практически неизменными и составляют порядка 3.5μB. При АФМ-упорядочении, наоборот, величина магнитного момента ионов Fe увеличивается и стремится к значениям, близким к значениям в случае ФМ-упорядочения.

В табл. 10 представлено сравнение полных энергий в случаях ФМ- и АФМ-упорядочений для FeSiO3. Из полученных результатов видно, что более энергетически выгодным является ФМ-упорядочение, хотя выигрыш в энергии составляет порядка сотых, а при U = 3 эВ — тысячных. Видно, что при увеличении параметра кулоновского взаимодействия будет увеличиваться значение полной энергии. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами предыдущего расчета: 3.8±0.1μB [6], а также с результатами эксперимента: 4.0±0.1μB [13].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были выполнены расчеты электронной структуры оксидных соединений железа FeAlO3 и FeSiO3, которые встречаются в нижней мантии Земли. Расчеты проведены в

рамках приближения обобщенной градиентной поправки, а также при помощи метода DFT+U с учетом электронных корреляций. Рассмотрено формирование ферро- и антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов железа в FeAlO_3 и FeSiO_3 . Обнаружено, что в FeAlO_3 и FeSiO_3 при увеличении параметра U открывается энергетическая щель. В отличие от FeAlO_3 , где энергетическая щель присутствует уже в расчетах GGA для антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe, в соединении FeSiO_3 энергетическая щель открывается при достаточно больших значениях параметра U . При увеличении параметра кулоновского взаимодействия U для FeAlO_3 как в случае ФМ-, так и в случае АФМ-упорядочения, энергетическая щель увеличивается пропорционально параметру U . В результате расчетов были получены значения магнитных моментов Fe для соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 . Для расчетов с учетом электронных корреляций наблюдается тенденция увеличения магнитного момента Fe при увеличении параметра U . Сравнение полных энергий для каждого из соединений показало, что самым энергетически выгодным состоянием для FeAlO_3 является АФМ-упорядочение магнитных моментов Fe, а для FeSiO_3 — ФМ-упорядочение магнитных моментов Fe в соответствии с экспериментальными данными.

Финансирование. Результаты исследований, представленные в разд. 3, получены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов №№ 19-52-18008, 20-02-00234. Результаты исследований, представленные в разд. 4, получены в рамках государственного задания Министерства образования и науки России (тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5).

ЛИТЕРАТУРА

1. Z. Mao, F. Wang, J.-F. Lin, S. Fu, J. Yang, X. Wu, T. Okuchi, N. Tomioka, V. B. Prakapenka, Y. Xiao, and P. Chow, *Amer. Mineralogist* **102**, 357 (2017).
2. R. Jeanloz and A. B. Thompson, *Rev. Geophys.* **21**, 51 (1983).
3. H. Hsu, Y. G. Yu, and R. M. Wentzcovitch, *Earth Planet. Sci. Lett.* **359**, 34 (2012).
4. S. Stackhouse, J. P. Brodholt, and G. D. Price, *Earth Planet. Sci. Lett.* **253**, 282 (2007).
5. R. E. Cohen, I. I. Mazin, and D. G. Isaak, *Science* **275**, 654 (1997).
6. A. A. Dyachenko, A. O. Shorikov, A. V. Lukoyanov, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **93**, 245121 (2016).
7. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
8. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
9. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 767 (1997).
10. F. Bouree, J. L. Baudour, E. Elbadraoui, J. Musso, C. Laurent, and A. Rousset, *Acta Crystallogr. Sec. B Struct. Sci.* **52**, 217 (1996).
11. R. Caracas, *Phys. Earth Planet. Interiors* **182**, 10 (2010).
12. D. A. H. Jones, A. B. Woodland, and R. J. Angel, *Amer. Mineralogist* **79**, 1032 (1994).
13. S. G. Eeckhout, E. de Grave, A. Lougear, M. Gerdan, C. A. McCammon, A. X. Trautwein, and R. Vochten, *Amer. Mineralogist* **86**, 957 (2010).