

УДК 539.143.4

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В МЕДЬ-КИСЛОРОДНОЙ ПЛОСКОСТИ В СИСТЕМЕ La_2CuO_4

Фролов А.С., Давлитова Г.Д., Галиазметов В.Д., Погорельцев А.И.,
Матухин В.Л.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: darkmay34@gmail.com*

Изучение спектров ЯКР ядер ^{139}La показало, что в купрате лантана при не слишком высоких температурах проявляются антиферромагнитные свойства, характеризуемые внутренним магнитным полем $H = 1000$ Э, исчезающим с повышением температуры ($T > T_N$).

В настоящей работе полученные из экспериментов ЯКР в системе La_2CuO_4 квадрупольные частоты были использованы для исследования особенностей распределения электронной плотности (ЭП) в определяющей медь-кислородной плоскости в немагнитной фазе данного соединения – использовалась экспериментально полученная частота перехода $5/2-3/2$ для температуры 270 К (при $T_N \sim 250$ К). Были проведены построения карт распределения электронной плотности (ЭП) в рамках теории Бейдера, лапласиана ЭП, функции локализации электронов (ELF), локализованного орбитального локатора (LOL). Выполнен предварительный анализ топологии распределения электронной плотности.

Исследование медь – кислородная плоскости выявило наличие общей для всех атомов плоскости изолинии электронной плотности (см. рисунок) на уровне 0.08 $e/\text{Å}^3$. Можно предположить наличие заметного количества обобщенных электронов в межатомных областях. При этом величины ELF и LOL также несколько увеличиваются (~ 0.350). Была также рассчитано значение щели LUMO-HOMO, которое составляет величину $\Delta \sim 5.93$ eV, что типично для диэлектрика. В настоящее время аналогичные исследования проводятся для антиферромагнитной области ($T < 250$ К) и области непосредственно фазового перехода ($T \sim 250$ К).