

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ОБЛАСТИ КВАДРУПОЛЬНОГО ЯДРА $\text{Cu}_2$ В КОВЕЛЛИНЕ $\text{CuS}$ .

Н.А. Логинов, А.И. Погорельцев, В.Л. Матухин, Е.В. Шмидт, Д.А. Шульгин  
ФГБОУ ВПО «Казанский государственный энергетический университет», 420066, ул.  
Красносельская, 51, г. Казань, Россия,  
*apogoreltsev@rambler.ru.*

В настоящей работе приведены результаты исследований распределения электронной плотности в области квадрупольного ядра  $\text{Cu}_2$  (тетрагональное окружение атома меди) в ковеллине  $\text{CuS}$ . Использовался кластерный подход с “опорой” на квадрупольные параметры. В качестве опорного параметра была использована частота ЯКР  $^{63}\text{Cu}$   $\nu_Q = 1,87$  МГц, полученная в работе [1] для температуры 4,2 К. Оценки ГЭП на ядрах меди были выполнены *ab initio* методом SCF-LCAO-ROHF (базис MINI) с помощью программы FIREFLY [2]. Наибольший кластер, для которого проводились расчеты, имел формулу (для позиции  $\text{Cu}_2$ )  $\text{Cu}_{21}\text{S}_{28}^n$  ( $R \sim 6\text{\AA}$ , 49 атомов), где  $n$  - заряд кластера, который определялся из серии расчетов. Наилучшее согласие было получено для заряда  $n=4$ :  $\nu_Q = 1.874$  МГц,  $\eta = 0.2135$ . Для кластера  $\text{Cu}_{21}\text{S}_{28}^4$  строились карты распределения электронной плотности в области квадрупольного ядра  $\text{Cu}_2$  и проводился анализ в рамках теории Р. Бейдера. Было также найдено, что величина щели LUMO – HOMO составляет  $\Delta \sim 0.15$  eV, что может указывать на близость перехода в проводящее состояние при дальнейшем понижении температуры.

1. Gainov, R. R. Phase transition and anomalous electronic behavior in layered dichalcogenide  $\text{CuS}$  (covellite) probed by NQR / R. R. Gainov, A. V. Dooglav, I. N. Pen'kov, I. R. Mukhamedshin, N. N. Mozgova, I. A. Evlampiev, and I. A. Bryzgalov. // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79. P. 075115.
2. Granovsky, A. A. / A.A. Granovsky. Firefly version 7.1.G, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>