

بررسی اثر فشار بر روی خصوصیات اپتیکی فاز Perovskite و Post-Perovskite بلور $MgSiO_3$

باعدی، جواد^۱؛ جامی، ماریا^{۱*}؛ مجیدیان، مسعود^۱؛ اسلامی مقدم، زهرا^۱؛ حسینی، محمد^۲

^۱گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم سبزوار
^۲گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی، چگالی حالت‌های انرژی، تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست و گاف اپتیکی بلور $MgSiO_3$ ارائه شده است. محاسبات به روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده‌ی خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) بر روی دو فاز Perovskite (Pv) و Post-Perovskite (PPv) انجام شده است. به علت حضور این ترکیب در فشارهای زیاد نتایج بدست آمده با بهینه سازی حجم انجام شده است. ثابت‌های اپتیکی را می‌توان با اعمال تبدیلات کرامرز-کرونیک در تانسور دی‌الکتریک مختلط به دست آورد.

Study of Pressure effect in Optical properties of Perovskite and Post-Perovskite $MgSiO_3$ phases

Baedi, Javad¹; Jami, Maria^{1*}; Majidian, Masoud¹; Eslami Moghadam, Zahra¹; Hosseini, Mohammad²

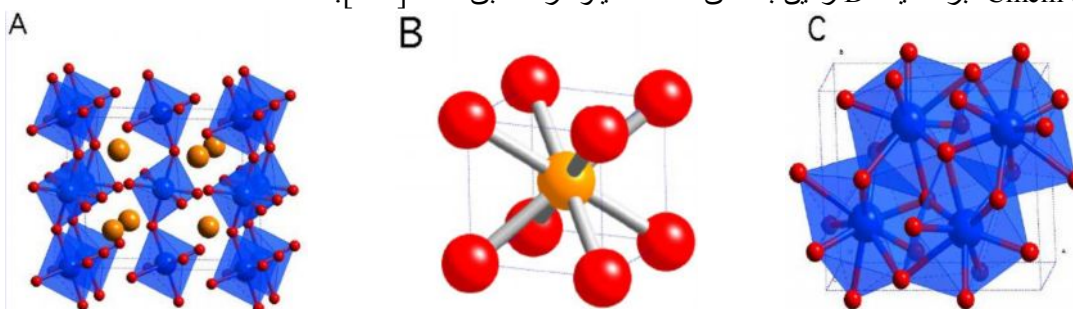
¹ Department of Physics, Tarbiat Moallem Universit of Sabzevar,
² Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad

Abstract

In this paper optical propertie ,density of energy states, dielectrics function refraction index and band gap for $MgSiO_3$ crystal have been calculated. The calculations were performed in the framework of density functional theory (DFT), using the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method with the generalized gradient approximation (GGA) on Perovskite(Pv) and Post-Perovskite(PPv) phases. Because of this phase was formed under large pressure the calculated result evaluated valume . The optical constants were obtained by using the eramers- Keronig transformations in imagery dielectric tensor.

مقدمه

بلور $MgSiO_3$ به عنوان فراوان‌ترین کانی در زمین حدود ۷۰ تا ۸۰ درصد پوسته زمین را تشکیل می‌دهد. مطالعه بر روی خواص این ترکیب می‌تواند برخی از رفتارهای جبهی زمین را توضیح دهد. در سال‌های اخیر گروهی از دانشمندان بر این عقیده بودند که این ترکیب در فاز بلوری Pv پایدار است، در حالی‌که شیم و همکارانش نشان دادند که یک تغییر فاز در فشار ۸۳ GPa رخ می‌دهد. این انتقال فاز با تغییراتی در مکعب ایده‌آل پرویسیکایت همراه است که ناشی از دوران هشت وجهی SiO_6 می‌باشد (شکل ۱) و در نهایت فاز فشار بالای PPv ایجاد می‌شود این فاز با تقارن بلوری Cmcmm بر ناحیه D" زمین با عمق ۲۷۰۰ کیلومتر منطبق است [۱-۲].



شکل ۱: انتقال فاز بلوری Pv به PPv در بلور $MgSiO_3$

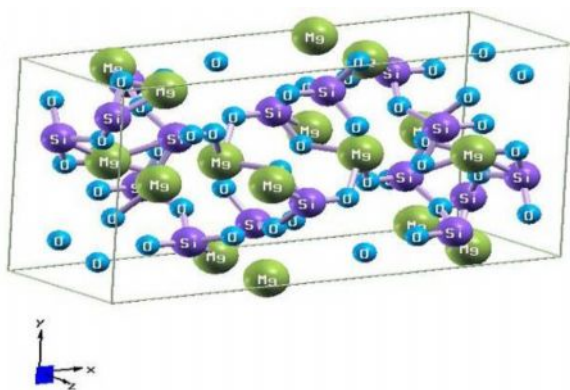
در دو فاز بلوری Pv و PPv ، $MgSiO_3$ اختلافات جالبی در مورد خواص فیزیکی مشاهده شده است، که برای توضیح مشاهدات ناحیه "D زمین و همچنین برای مدل‌سازی رسانندگی پوسته‌ای مورد استفاده قرار گرفته است. از آنجا که بررسی تجربی لایه‌های درونی زمین تحت فشار بالا کار دشواری است لذا بررسی تئوری این لایه‌ها ضروری به نظر می‌رسد. در این مقاله نتایج حائز اهمیتی درباره‌ی خواص الکترونیکی و اپتیکی در دو فاز Pv با تقارن بلوری PbcA و PPv با تقارن بلوری CmcM در بلور $MgSiO_3$ بدست آمده است که این خواص می‌توانند رسانندگی الکتریکی در لایه‌های مختلف زمین را بر اساس تغییر فازهای بلوری شبیه سازی کند [۳].

روش محاسبات

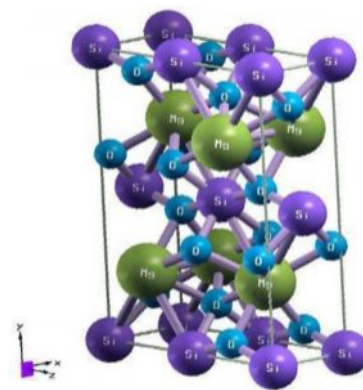
محاسبات این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، تحت تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA)، با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FO-LAPW) و به کمک کد WIEN2k صورت گرفته است. انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزی $1/1$ Ryd- در نظر گرفته شده است. شعاع کره مافین- تین به گونه‌ای انتخاب می‌شود که انبساط و انقباض ترکیب منجر به همپوشانی ابر الکترونی اتم‌های همسایه نگردد [۴-۵].

در این مقاله به بررسی فاز فشار بالای PPv با تقارن بلوری CmcM ، دارای ۴ جایگاه اتمی و ۱۰ اتم پرداخته شده است (شکل ۲- الف). در این ترکیب شعاع کره مافین- تین برای اتم Mg، Si و O به ترتیب مقدار $1/83$ a.u.، $1/5$ a.u. و $1/5$ a.u. در نظر گرفته شده است.

همچنین به مطالعه فاز Pv با تقارن بلوری PbcA پرداخته شده است، شعاع کره مافین- تین برای اتم Mg، Si و O به ترتیب مقدار $1/39$ a.u.، $1/51$ a.u. و $1/39$ a.u. در نظر گرفته شده است. بلور $MgSiO_3$ در این تقارن دارای ۱۰ جایگاه اتمی و ۸۰ اتم است (شکل ۲- ب). نام صنعتی این ترکیب در این فاز Instatite است.



شکل ۲- ب : ساختار تقارن بلوری PbcA



شکل ۲- الف : ساختار تقارن بلوری CmcM

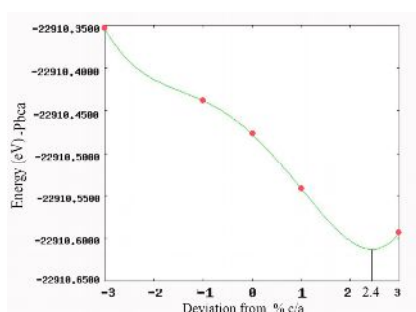
مکان‌های اتمی برخی از اتم‌ها در دو فاز بلوری Pv و PPv در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱: مکان‌های اتمی در دو فاز PPv و Pv

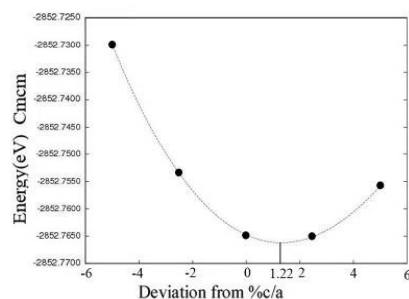
اتم	جایگاه اتمی با تقارن بلوری PbcA [۶]	اتم	جایگاه اتمی با تقارن بلوری CmcM [۷]
Mg1	(۰/۳۷۶۳, ۰/۴۵۴۱, ۰/۸۶۳۰)	Mg	(۰, ۰/۲۵۶, ۰/۲۵)
Si1	(۰/۲۷۱۵, ۰/۳۴۱۸, ۰/۰۵۰۶)	Si	(۰/۰, ۰/۰, ۰/۰)
O3	(۰/۳۵۲۵, ۰/۲۲۲۴, ۰/۸۳۲۰)	O1	(۰, ۰/۹۴۳, ۰/۲۵)
O5	(۰/۴۳۲۴, ۰/۴۸۳۶, ۰/۶۹۰۰)	O2	(۰, ۰/۶۴, ۰/۴۴۲)

بحث و نتایج

با توجه به این که فشار عامل مهمی در انتقال فاز در ترکیبات بلوری $MgSiO_3$ است لذا برای تعیین ثابت‌های شبکه با استفاده از ثابت‌های تجربی از فرایند بهینه‌سازی حجم نسبت به انرژی استفاده می‌کنیم که در این فرایند مقدار ثابت تعادلی a ، b و c از کمینه کردن انرژی به دست می‌آید. شکل ۳ نمودار بهینه‌سازی حجم این ترکیبات را بر اساس تغییر نسبت c/a نشان می‌دهد. مقدار کمینه انرژی برای تقارن بلوری $Pbca$ در $2/4\%$ و برای تقارن بلوری $Cmcm$ در $1/22\%$ به دست آمده است.



شکل ۳- ب: تغییرات انرژی به ازای مقادیر مختلف $Pbca$ در c/a تقارن بلوری



شکل ۳- الف: تغییرات انرژی به ازای مقادیر مختلف $Cmcm$ در c/a تقارن بلوری

نتایج به دست آمده در جدول ۲ خلاصه شده است، که در توافق خوبی با نتایج دیگران می‌باشد. با به دست آمدن پارامترهای بهینه‌ی شبکه، محاسبات چگالی حالت‌ها و خواص اپتیکی بر اساس مقادیر ثابت‌های جدید انجام شده است.

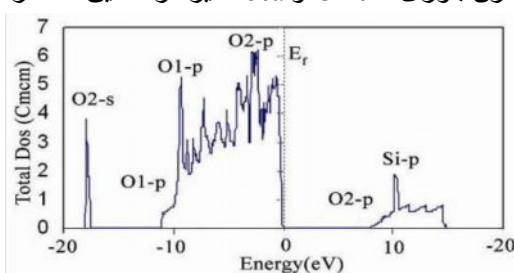
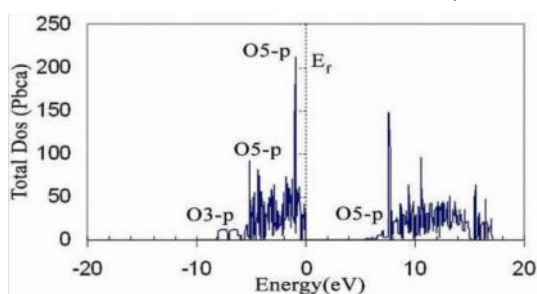
جدول ۲: مقایسه ی ثابت های بدست آمده با تقریب GGA و نتایج دیگران

روش	ساختار*	فاز	تعداد تقارن	$a(\text{\AA})$	$b(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$
تجربی [۶]	$Pbca$	Pv	۸	۱۸/۲۳	۸/۸۱	۵/۱۸
GGA (نتایج کنونی)	$Pbca$	Pv	۸	۱۸/۳۸	۸/۸۹	۵/۰۹
تجربی [۷]	$Cmcm$	PPv	۸	۲/۴۶	۸/۱۱	۶/۱۵
GGA (نتایج کنونی)	$Cmcm$	PPv	۸	۲/۴۷	۸/۱۴	۶/۱۰

* این ساختارها اورترومبیک بوده و زوایای داخلی آن‌ها $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ است

همان‌طور که از شکل‌های ۴ و ۵ مشخص است سهم عمده چگالی حالت‌ها در زیر تراز فرمی در تقارن بلوری $Cmcm$ مربوط به اوربیتال‌های p اتم اکسیژن دوم و در تقارن بلوری $Pbca$ مربوط به اوربیتال‌های p اتم اکسیژن پنجم است. در بالای تراز فرمی نیز در تقارن بلوری $Pbca$ سهم عمده مربوط به اوربیتال p اتم اکسیژن پنجم می‌باشد. در صورتی که در تقارن بلوری $Cmcm$ علی‌رغم وجود سهم‌های ناشی از اتم اکسیژن دوم اوربیتال p اتم‌های Si نیز سهمی در چگالی حالت‌ها در بالای تراز فرمی ایفا می‌کند. و از آنجایی که در ترکیب بلوری $MgSiO_3$ تعداد اتم‌های اکسیژن خیلی بیشتر از اتم‌های Si می‌باشد، لذا می‌توان گفت رسانندگی در این بلور شدیداً تحت تأثیر اتم‌های اکسیژن قرار دارد.

گاف انرژی بر اساس چگالی حالت‌های کلی در تقارن بلوری $Pbca$ در فشار صفر GPa حدود $5/41$ eV به دست آمده است و برای تقارن بلوری $Cmcm$ نیز در فشار 116 GPa، $7/9$ eV محاسبه شده است. مقدار این گاف برای این فاز در فشار 86 GPa توسط یانلینگ لی $7/5$ eV به دست آمده است [۸]. اختلاف در گاف انرژی، حاصل از افزایش فشار در این فاز می‌باشد. افزایش فشار باعث می‌شود که قله‌های چگالی حالت‌ها در نوار ظرفیت به طرف انرژی‌های کمتر و در نوار هدایت به طرف انرژی‌های بیشتر سوق یابند [۸]. این مطلب در مورد تفاوت گاف‌ها در دو تقارن بلوری $Pbca$ و $Cmcm$ نیز در تحقیق حاضر مشاهده شده است.



شکل ۴: چگالی حالت های کلی انرژی در تقارن بلوری CmcM شکل ۵: چگالی حالت های کلی انرژی در تقارن بلوری Pbca

از تانسور دی الکتریک برای بررسی و توصیف پاسخ بلور به میدان های الکترومغناطیسی در راستاهای مختلف استفاده می شود. قسمت حقیقی این تابع را با $\varepsilon_1(\omega)$ و قسمت موهومی را با $\varepsilon_2(\omega)$ نمایش می دهیم در این صورت خواهیم داشت:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (1)$$

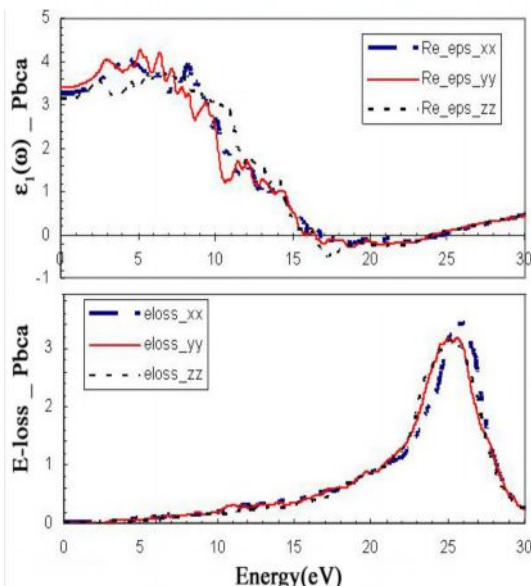
قسمت موهومی تابع دی الکتریک به وسیله ای آگاهی از ساختار نواری الکترونی یک جامد می تواند محاسبه شود در حد اپتیک خطی با اسپین های غیر قطبیده و در چهارچوب تقریب فاز تصادفی ما می توانیم از روابط شناخته شده ی زیر استفاده کنیم:

$$\text{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}^{\{inter\}}(\omega) = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{c,v} \int dk \langle C_k | p^\alpha | V_k \rangle \langle V_k | p^\beta | C_k \rangle \delta(\varepsilon_{C_k} - \varepsilon_{V_k} - \omega) \quad (2)$$

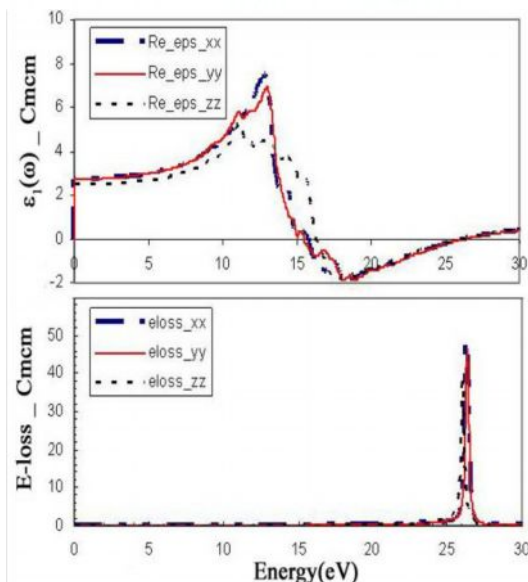
که P عناصر ماتریسی اندازه حرکت بین حالت نوارهای α و β با اندازه حرکت بلوری k است. در معادله ی ۲، c_k و v_k توابع موج بلوری متناظر با نوارهای رسانش و ظرفیت با بردار موج بلوری k است. جمله ی بین نواری قسمت های حقیقی، متناظر با تبدیلات Kramers-Kronig است:

$$\text{Re} \varepsilon_{\alpha\beta}^{\{inter\}}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\omega' \text{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3)$$

در تقارن بلوری CmcM مقدار تابع دی الکتریک استاتیک در جهت x و y تقریباً یکسان هستند که به ترتیب دارای مقدار ۲/۷۲ و ۲/۷۳ می باشند. این مقادیر از مقدار تابع دی الکتریک استاتیک در جهت z که دارای مقدار ۲/۴۹ است بیشتر می باشند. و می توان نتیجه گرفت تابع دی الکتریک در دو جهت x و y تفاوت چندانی ندارند ولی در جهت z تا حدود ۲۰ eV با دو جهت دیگر کاملاً متفاوت است و در نهایت در انرژی های بالا هر سه جهت به یک مقدار میل می کنند. همچنین بیشینه مقدار تابع دی الکتریک در جهت z در انرژی کمتری نسبت به دو جهت دیگر قرار گرفته است. برای قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در سه جهت، دو ریشه به دست آمده که مقدار ریشه تابع دی الکتریک در سه جهت در انرژی های بالا تقریباً یکسان است. ریشه های تابع دی الکتریک نوسانات پلاسمونی را مشخص می کنند البته برای بررسی دقیق نوسانات پلاسمون ها باید رفتار تابع اتلاف انرژی را همزمان در نظر گرفت همان طور که از شکل ۶- ب مشاهده می شود تا حدود ۱۶ eV اتلافی نداریم که این گستره با مکان اولین ریشه در تابع دی الکتریک همخوانی دارد. همچنین تنها قله برجسته در تابع اتلاف انرژی نشان می دهد نوسانات پلاسمونی برای این فاز در جهت x در ۲۶/۲۹ eV، در جهت y در ۲۶/۲۱ eV و در جهت z در ۲۶/۰۵ eV رخ می دهد که این نیز با مقدار دومین ریشه در قسمت حقیقی تابع دی الکتریک و یا اولین ریشه با شیب مثبت در این نمودار همخوانی دارد. باید توجه داشت که قله ها در این سه جهت بسیار به یکدیگر نزدیک هستند.



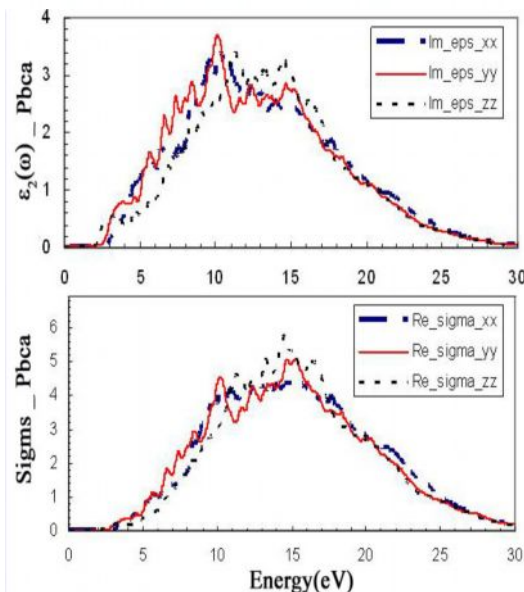
شکل ۷ - الف: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در فاز PbcA
شکل ۷ - ب: تابع اتلاف انرژی در فاز PbcA



شکل ۶ - الف: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در فاز PPv
شکل ۶ - ب: تابع اتلاف انرژی در فاز PPv

رفتار اپتیکی فاز پرویسیکایت $MgSiO_3$ با تقارن بلوری PbcA بسیار متفاوت با فاز فشار بالای PPv با تقارن بلوری CmcA است. از شکل ۷-الف مشاهده می شود که تعداد بیشینه های نسبی قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در این فاز نسبت به تقارن بلوری CmcA بیشتر است، این بیشینه ها در انرژی های پایین تری نسبت به فاز Pv اتفاق می افتد. مقدار تابع دی الکتریک استاتیکی در هر سه جهت با هم متفاوتند و به ترتیب در جهت های x، y و z دارای مقدار $3/24$ ، $3/39$ و $3/14$ می باشند. می توان گفت که در این فاز تابع دی الکتریک در تمام گستره انرژی ناهمسانگرد است همچنین مانند تقارن بلوری CmcA دارای دو ریشه است ولی از مقایسه شکل ۷-الف و ۷-ب مشاهده می شود مقدار تابع دی الکتریک در ناحیه غیرمجاز (منفی) در تقارن بلوری PbcA نسبت به تقارن بلوری CmcA بسیار نزدیک تر به مقدار صفر تابع دی الکتریک است. لذا تابع اتلاف انرژی در این فاز بسیار پهن تر نسبت به تقارن بلوری CmcA به دست می آید. مقدار بیشینه اتلاف در سه جهت x و y و z به ترتیب در انرژی های $25/48$ eV، $25/59$ eV و $25/79$ eV قرار گرفته است که مقدار بیشینه آن نسبت به تقارن بلوری CmcA کاهش یافته است. همچنین پهن شدگی این تابع حاکی از آن است که نوسانات پلاسمونی برای فاز Pv در گستره وسیعی از انرژی اتفاق می افتد.

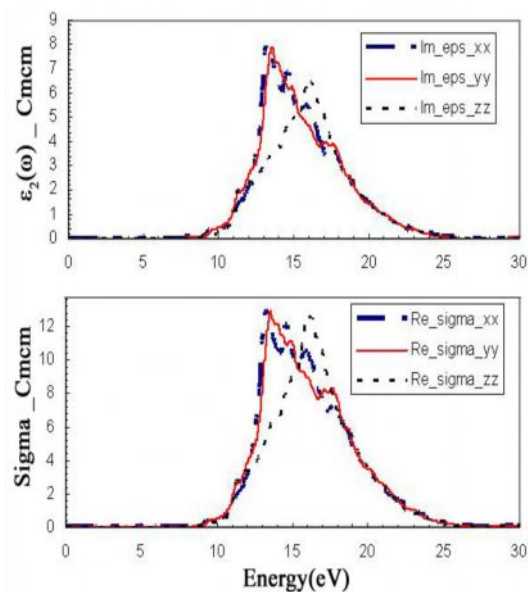
شکل ۸ هدایت اپتیکی در فاز PPv با تقارن CmcA را نشان می دهد. هدایت اپتیکی در جهت های x و y تقریباً یکسان است ولی اختلاف عمده ای بین هدایت اپتیکی در جهت z وجود دارد. چهار قله در راستای x و y، متناظر با انتقال های محتمل الکترونی است. در صورتی که در جهت z تنها یک قله برجسته وجود دارد که تقریباً هم ارتفاع با اولین قله، در راستای x و y است. با این تفاوت که یک جابجایی انرژی مثبت در حدود 3 eV نسبت به اولین قله در جهت x (13 eV) دارد. هدایت اپتیکی در جهت های x و y از مقدار $9/04$ eV و در جهت z از $9/23$ eV آغاز می شود. بنابراین می توان گفت که گاف اپتیکی در سه جهت تفاوت چندانی ندارد. چهار قله مربوط به انتقال های اربیتال p اتم اکسیژن به اربیتال s اتم Si، انتقال های اربیتال p اتم اکسیژن به اربیتال s اتم Mg، انتقال های اربیتال p اتم اکسیژن به اربیتال p اتم Si، و چهارمین قله ناشی از انتقال های اربیتال p اتم اکسیژن به اربیتال p اتم Mg می باشد.



شکل ۹- الف : قسمت موهومی تابع دی الکتریک در فاز Pv

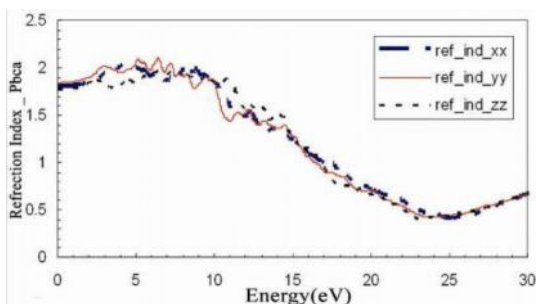
شکل ۹- ب : قسمت حقیقی هدایت اپتیکی در فاز Pv

شکل ۹ هدایت اپتیکی در تقارن بلوری Pbca را نشان می‌دهد. در مقایسه با تقارن بلوری Cmcm تعداد قله‌ها افزایش یافته است. لذا می‌توان نتیجه گرفت که انتقال‌های الکترونی در این فاز خیلی بیشتر از تقارن بلوری Cmcm است. همچنین دیده می‌شود، ناهمسانگردی هدایت اپتیکی در این فاز خیلی بیشتر از تقارن بلوری Cmcm است. هدایت اپتیکی در این فاز در جهت‌های x، y و z به ترتیب از ۲/۶ eV، ۲/۵ eV و ۲/۲ eV آغاز می‌گردد که نسبت به جهت‌های مشابه در تقارن بلوری Cmcm در انرژی‌های پایین‌تری قرار دارند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت گاف اپتیکی در این فاز خیلی کوچکتر از تقارن بلوری Cmcm است. علاوه بر این هدایت اپتیکی بر خلاف تقارن بلوری Cmcm در گستره‌ی انرژی وسیع‌تری وجود دارد.

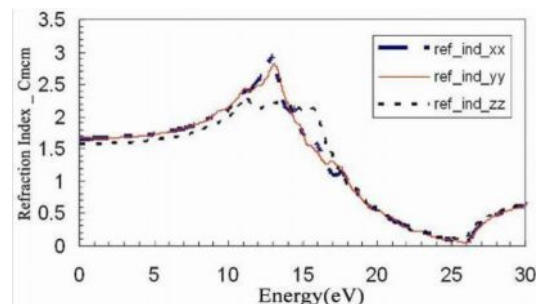


شکل ۸- الف : قسمت موهومی تابع دی الکتریک در فاز PPv

شکل ۸- ب : قسمت حقیقی هدایت اپتیکی در فاز PPv



شکل ۱۰- ب : ضریب شکست در تقارن بلوری Pbca



شکل ۱۰- الف : ضریب شکست در تقارن بلوری Cmcm

با توجه به شکل ۱۰- الف می‌توان نتیجه گرفت که ضریب شکست فاز PPv در دو راستای x و y تقریباً یکسان هستند ولی مقدار ضریب شکست این فاز در راستای z با دو راستای دیگر متفاوت است به گونه‌ای که در این راستا مقدار ضریب شکست نسبت به دو راستای دیگر کوچکتر است. مقدار بیشینه در راستای z تفاوت بسیاری با بیشینه ضریب شکست در دو راستای دیگر دارد. بنابراین نتیجه گرفته می‌شود که این فاز خاصیت دوشکستی دارد. شکل ۱۰- ب نیز تغییرات ضریب شکست بر حسب انرژی فوتون فرودی در فاز Pv را نمایش می‌دهد. بر خلاف فاز PPv ضریب شکست در فاز Pv ناهمسانگردی بالایی را از خود نشان می‌دهد. مقدار ضریب شکست استاتیکی در این فاز از فاز PPv بزرگتر است. مقدار ضریب شکست در این فاز بین مقادیر حدودی ۱/۸ تا ۲ قرار می‌گیرد در صورتی که بیشینه‌ی ضریب شکست در فاز PPv به مقدار n=۳ نیز می‌رسد. بنابراین نتیجه می‌شود که کاهش فشار

بر روی ترکیبات $MgSiO_3$ باعث افزایش ناهمسانگردی و خاصیت دوشکستی ضریب شکست در این ترکیبات شده و مقدار ضریب شکست را در انرژی‌های پایین، بین مقادیر معینی محدود می‌کند.

نتیجه‌گیری:

کاهش فشار از لایه‌های درونی زمین به سمت لایه‌های بیرونی، مترادف با تغییرات فازی ترکیبات $MgSiO_3$ از فاز PPV با تقارن بلوری CmcM به فاز Pv با تقارن بلوری PbcA است. این تغییر فشار و فاز تأثیرات عمده‌ای بر خواص الکتریکی و اپتیکی این ترکیبات دارد. در هر دو فاز خواص الکتریکی و رسانندگی مربوط به همپوشانی اربیتال‌های p اتم‌های اکسیژن می‌باشد ولی کاهش فشار باعث کاهش گاف انرژی شده است که این مسئله توضیحی برای کاهش رسانندگی با افزایش عمق در لایه‌های زمین می‌باشد. رفتار اپتیکی این ترکیب در فشارهای مختلف کاملاً متفاوت است. در هر دو فاز نوسانات پلاسمونی در انرژی‌های بالا اتفاق می‌افتد با این تفاوت که پهنای قله‌ی اتلاف انرژی در فشار پایین بسیار بیشتر از فاز PPV است. به علاوه تغییر فشار به‌طور چشمگیری مقدار گاف اپتیکی را تغییر داده است. همچنین کاهش فشار بر روی ترکیبات $MgSiO_3$ باعث افزایش ناهمسانگردی و خاصیت دوشکستی ضریب شکست در این ترکیبات شده است.

مرجع‌ها

- [1] R. Caracas and R. E. Cohen; "Theoretical determination of the Raman spectra of $MgSiO_3$ perovskite and post-perovskite at high pressure"; *Journal of Applied Physics* 92, (2002) 440_444
- [2] B. B. Karki and G. Khanduja; "Computational study of ionic vacancies and diffusion in $MgSiO_3$ perovskite and post-perovskite"; *Earth and Planetary Science Letters* 260, (2007) 201_211.
- [3] A. R. Oganov, R. Martonuk, A. Laio, P. Raiteri and M. Parrinell; "Anisotropy of Earth's D" layer and stacking faults in the $MgSiO_3$ post-perovskite phase"; *Nature* 438 (2005) 1142_1144
- [4] P. Blaha, D. Singh, P. I. Sorantini and K. Schwarz; "Electric field gradient calculations for systems with large extended-core-state contributions"; *Phys. Rev B* 46, (1992) 1321-1325.
- [5] P. Blaha, D. Singh and K. Schwarz; *Wien2k*. Vienna University of Technology Austria (2002). www.wien2k.at
- [6] M. Alfredsson, J. P. Brodholt, D. P. Dobson, A. R. Oganov, C. R. A. Catlow, S. C. Parker and G. D. Price; "Crystal morphology and surface structures of orthorhombic $MgSiO_3$ perovskite"; *Phys Chem minerals* 31 (2005) 671_682
- [7] M. Sternik and K. Parlinski; "Ab initio calculations of the stability and lattice dynamics of the Study of the $MgSiO_3$ Post-Perovskite"; *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 67 (2006) 796_800
- [8] Y. Li and Z. Zeng; "First-Principles Study of the Structural, Electronic and Optical Properties of $MgSiO_3$ at high pressure"; *Journal of Modern Physics C* (2009)