

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ AlSi_2P И GaGe_2As

Ю.М. Басалаев, О.Г. Басалаева

Кемеровский государственный медицинский университет, г. Кемерово, Россия

Методами теории функционала плотности получены равновесные параметры кристаллической решетки. Изучены электронное строение и колебательные свойства гипотетических кристаллов AlSi_2P и GaGe_2As аналогов супертвердого кристалла BC_2N . Рассчитаны энергетическая зонная структура, длинноволновые частоты колебаний в точке Г, модули упругости, коэффициенты Пуассона и микротвердости. Установлена роль элементов IV группы и определены вклады колебаний отдельных атомов в колебательные моды кристалла.

Ключевые слова: халькопирит, AlSi_2P , GaGe_2As , оптические фононные моды, модули упругости.

Введение

Поиск материалов, обладающих совокупностью полупроводниковых свойств, высокой химической устойчивости и экстремальной твердости, сопоставимой с твердостью алмаза и кубического нитрида бора (с-BN), инициировал синтез соединений $\text{B}_x\text{C}_y\text{N}_z$ с разной концентрацией (x , y и z соответственно) и кристаллической структурой [1–21]. Результатом этих работ, где были изучены различные структурные модификации, полученные экспериментально методами химического осаждения (chemical vapor deposition, CVD), вакуумного напыления (physical vapor deposition, PVD), алмазных наковален (diamond-anvil cell, DAC), высокой температуры и высокого давления (High Pressure High Temperature, HPHT), стал вывод, что одной из перспективных кристаллических структур соединений $\text{B}_x\text{C}_y\text{N}_z$ является структура типа халькопирита (CuFeS_2) с пространственной группой D_{2d}^{12} (или $I\bar{4}2d$, № 122). Однако синтезировать такой алмазоподобный и изоэлектронный аналог халькопирита ($\text{BNC}_2 \equiv \text{BC}_2\text{N}$) до сих пор не удалось из-за технических трудностей и специфики технологических условий эксперимента: высокие давления от 7 до 20 ГПа и высокая температура порядка 2000 °C [8, 22, 23]. В частности, переход из гексагональной фазы (BC_2N) в кубическую (с- BC_2N) был осуществлен в работе [8] под давлением 18 ГПа при температуре более 2200 °C.

Теоретические исследования гексагональной, орторомбической, тетрагональной и кубической структур кристаллов B_2CN и BC_2N проведены в работах [1, 4, 8, 21, 24–26]. Впервые кристаллы ср- BC_2N со структурой халькопирита были изучены с помощью программного кода CASTEP [25, 26]. Итогом этих исследований стали параметры кристаллической решетки, данные об энергетической зонной структуре, оптических свойствах и динамике решетки тетрагонального ср- BC_2N . Моделирование фононного спектра супертвердого соединения ср- BC_2N [27] и изучение роли подрешеток в формировании зонной структуры и химической связи в кристаллах B_2CN , BC_2N , BCN_2 [28] позволило разобраться с особенностями заполнения решетки халькопирита атомами разного сорта.

Цель данной работы – исследование *ab initio* методом электронных, колебательных и механических свойств кристаллов AlSi_2P и GaGe_2As , являющихся изоэлектронными и изоструктурными аналогами кристалла BC_2N [27, 28] с решеткой халькопирита, входящих в группу мало изученных соединений III–IV₂–V.

Кристаллическая структура

Заполнение неэквивалентных подрешеток в структуре халькопирита с химической формулой AX_2B , реализуемое в кристаллах AlSi_2P и GaGe_2As , представлено на рис. 1. Атомы Si и Ge размещены в «анионной» подрешетке (X), атомы Al, Ga и P, As упорядоченно занимают позиции в соответствующей катионной подрешетке (A или B). На рис. 1 указаны позиции Вайкоффа (4a, 4b, 8d). Необходимые для расчетов координаты атомов в структуре халькопирита, изображенной на рис. 1, задавались следующим образом: A: (0, 0, 0) и (0, $a/2$, $c/4$); B: (0, 0, $c/2$) и (0, $a/2$, $3c/4$); X: (u , $a/4$, $c/8$), ($-u$, $3a/4$, $c/8$), ($3a/4$, u , $7c/8$), ($a/4$, $-u$, $7c/8$). Каждый атом в структуре халькопирита окружен четырьмя атомами другого сорта. В кристаллах AlSi_2P и GaGe_2As соответственно можно выделить «катионные» (катион в центре) AlSi_4 , GaGe_4 и «анионные» (анион в центре) PSi_4 , AsGe_4 тетраэдры. Атомы Si и Ge окружены двумя атомами из III группы (Al и Ga) и двумя атомами из V группы (P и As).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>