



Ідентифікатор подання: 73

Тип: Стендова доповідь

Моделювання електронної структури політипів нітриду бору

вівторок, 27 травня 2025 р. 13:55 (20 хвилин)

Першопринципним методом досліджено електронну структуру ряду гіпотетичних фаз на основі нітриду бору.

Матеріали на основі нітриду бору є важливими технологічними матеріалами сучасності [1, 2]. Параметри досліджених кристалічних структур були отримані шляхом аналізу результатів моделювання методом молекулярної динаміки з використанням пакету програм «Quantum ESPRESSO» [4]. На рис. 1 та в таблиці 1 приведено схеми елементарних комірок та параметри структур. Перший елемент в позначеннях структур — символ Пірсона, а другий — номер просторової групи.

Рис. 1. Схеми примітивних елементарних комірок C2-C4 досліджуваних кристалічних структур BC1-xNx, x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0.

Таблиця 1. Симетрія та параметри елементарних комірок досліджуваних кристалічних структур. Для моноклінних та триклінних структур приведено також кути між базисними векторами ґраток.

Фаза	Позначення	Симетрія	a (Å)	b (Å)	c (Å)
BC1/4N3/4 (C1)	mC16-8	Cm	7.819	5.119	4.421
			123.59°		
cP8-215	P-43m		3.659	3.659	3.659
oP8-25	Pmm2		2.591	2.482	7.651
BC1/2N1/2 (C2)	tP8-111	P-42m	3.544	3.544	3.893
oP8-25	Pmm2		2.549	2.497	7.905
			85.00°	89.96°	75.86°
aP8-1	P1		2.465	3.270	9.315
BC3/4N1/4 (C3)	mP8-6	Pm	4.539	2.552	5.386
			113.10°		
oP8-25	Pmm2		2.605	2.462	8.100
hR8-160	R3m		2.558	2.558	27.226
BC (C4)	tP8-136	P42/mnm	4.362	4.362	2.752
			97.91°		
mP8-10	P2/m		4.393	2.726	4.819

Зонна електронна структура та локальні парціальні щільності електронних станів (ЩЕС) ряду політипів BN ретельно досліджувались в роботах [4, 5]. Розрахунки виконані для ряду політипів з цих робіт підтвердили надійність використовуваної нами методики вивчення електронної структури. На рис. 2 представлено розраховані загальні ЩЕС в гіпотетичних сполуках C2- C4.

Рис. 2 Щільності електронних станів (ЩЕС) в сполуках C2-C4.

У випадку BN концентрація валентних електронів становить 8 електронів на елементарну комірку, а зонна структура утворюється зв'язуючими та антизв'язуючими станами, які розділені напівпровідниковою забороненою зоною. Коли азот заміщується вуглецем, концентрація валентних електронів зменшується, а рівень Фермі зміщується в напрямку зони зв'язуючих станів. В результаті ЩЕС на рівні Фермі буде зростати, а відповідна сполука буде дестабілізуватися. Однак це правило виконується не для всіх сполук C2-C4. Як можна бачити з рис. 2 воно виконується для C4-tP8-136 і структур C2 та C3. Ці сполуки є металічними завдяки скінченній величині ЩЕС на рівні Фермі. Псевдощільина навколо рівня Фермі в C4-tP8-136 вказує на те, що ця сполука має виявляти напівпровідникові властивості. Нарешті, C4-mP8-10 є напівпровідником з дуже вузькою забороненою зоною порядку 0,2 eV. Показано, що структури C2-C4 є металічними, за винятком двох сполук: C4-TP8-136 - напівметал, а C4-MP8-10 - напівпровідник з дуже вузькою забороненою зоною шириною 0,2 eV.

1. L.E. Toth. Transition Metal Carbides and Nitrides (New York, Academic, 1971).
2. P. Luo, Y. Zhao. Molecules 28 (2023) 6200.

3. P. Giannozzi et al. J. Phys. Condens. Matter 21 (2009) 395502.
4. J. Furthmuller et al. Phys. Rev. B 50 (1994) 606.
5. M. Topsakal et al. Phys. Rev. B 79 (2009) 115442.

Author: Пані ПАВЛОВА, Наталія (Український державний університет імені Михайла Драгоманова)

Співавтори: Д-р. ІВАЩЕНКО, Володимир (Інститут проблем матеріалознавства НАН України, Київ); ШЕВЧЕНКО, Володимир (Інститут проблем матеріалознавства НАН України, Київ)

Доповідач: Пані ПАВЛОВА, Наталія (Український державний університет імені Михайла Драгоманова)

Тип засідання: Радіаційна фізика та реакторне матеріалознавство

Класифікація за напрямком: Радіаційна фізика та реакторне матеріалознавство