

第一性原理对 tI16 - B₂CO 各向物性的研究

乔丽萍 祖 缘 任超超

(西藏民族大学信息工程学院 陕西 咸阳 712082)

【摘要】利用第一性原理研究了 tI16 - B₂CO 材料的结构电子等物理特性。tI16-B₂CO 的能带结构广泛应用于具有 HSE06 杂化功能的半导体材料中。并在不同压力下获得其机械稳定性和动态稳定性参数。

【关键词】密度泛函; 压力; 能带; 晶格常数

Studying of tI16 - B₂CO physical properties by using first-principles calculations

Abstract: The structural, electronic properties of B₂CO in the tI16 phases are studied by using first-principles calculations. The band structures of tI16-B₂CO are all widely used in semiconductor materials with HSE06 hybrid functional. The parameters of mechanical stability and dynamic stability are obtained under different pressures.

Key words: density functional; pressure; band; Lattice constants

引言

超硬材料作为一种重要的功能材料, 由于其在机械、光学、电子等方面的特殊性能, 在工业上得到了越来越广泛的应用, 超硬材料在高压下的物理性能也受到研究者的关注 [1, 2]。

Si Zhou 预测了一系列 B-C-O 基二维材料 (B₆O₃)_nC_m, 当 B:O 化学计量比为 2:1 时, (B₆O₃)_nC_m 表现出 1.0~3.9 eV 的半导体性质 [3]。Wang 等人通过密度泛函理论预测了 B₄C₀ 系统, 以期在 0~50 GPa 的压力范围内找到新的稳定的超硬材料 [4]。虽然目前的研究已经预测 B₂CO 基二维材料具有优异的性能, 但是相关报道依然很少。本论文通过密度泛函理论对 tI16-B₂CO 三元轻元素化合物在压力作用下的结构、稳定性、电子力学性能进行了系统的理论研究。

1、计算方法和计算模型

应用密度泛函理论第一性原理 CASTEP 软件, 采用广义梯度近似下的 PBE (Perdew Burke Ernherhof functionals) 函数方案处理电子间的交换-相互作用。计算采用超软赝势处理离子实与价电子之间相互作用, 并进行了收敛性测试, 选取平面波截断能为 480 eV, 能量收敛精度设为 4.0×10^{-6} eV/atom; 原子间相互作用力收敛精度设为 0.01 eV/Å; 晶体内应力收敛精度为 0.02 GPa。

2、结果与讨论

通过 PBE、PBEsol 和 CA-PZ 三种不同泛函体系研究 tI16-B₂CO 的晶格参列于表 1。计算结果与之前的理论结果很接近。金刚石的晶格参数也列在表 1 中, 金刚石 PBE 泛函计算结果比 PBEsol 泛函、CA-PZ 泛函的结果更接近实验值, 所以本次研究结果都是基于 PBE 泛函。不同压力下, tI16-B₂CO 的弹性常数如表 2 所示。由表 2 可知, tI16-B₂CO 所有的弹性常数都随着压力的增大而增大。对于 tI16-B₂CO 增长最快的是 C₁₃ 和 C₄₄, 增长最慢的是 C₃₃。为了探讨其在高压下的稳定性, 本文对其弹性常数和声子谱进行了研究。tI16-B₂CO 属于立方对称, 通过将弹性常数引入力学稳定条件, tI16-B₂CO 具有力学稳定性。其声子谱如图 1 所示, 图中可以看出, 布里渊区没有频率, 证明 tI16-B₂CO 是动态稳定的。

表 1 不同态密度计算方式下 0 GPa. 时 tI16-B₂CO 的晶格常数

材料	计算方法	a	b	c	ρ
tI16 - B ₂ CO	PBE	3.722		7.493	3.175
	PBEsol	3.722		7.515	3.167
	CA-PZ	3.664		7.376	3.329
金刚石	PBE	3.569			3.510
	PBEsol	3.558			3.544
	CA-PZ	3.531			3.624
Experiment		3.567			3.516

表 2 PBE 泛函计算得到的 tI16-B₂CO 和金刚石弹性常数 C_{ij}

材料	P	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{22}	C_{23}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}
tI16 - B ₂ CO	0	552	150	118			592	270		200
	10	603	183	150			644	315		292
	30	697	247	211			739	378		382
	50	786	307	272			827	426		441
金刚石	0	1052	120				563			

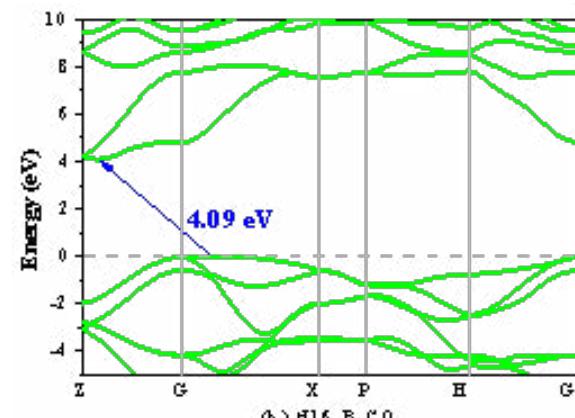
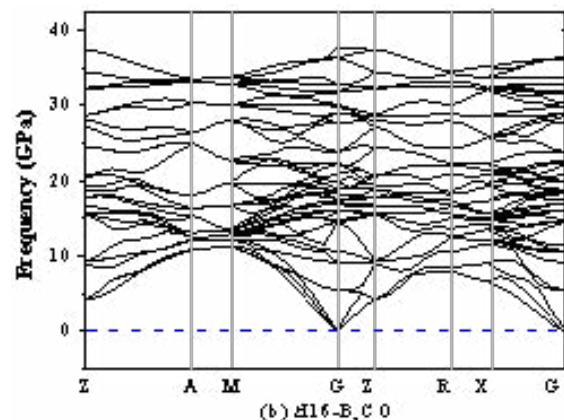


图 1. tI16-B₂CO 声子谱 图 2 tI16-B₂CO 能带模型

材料的能带结构决定了材料的许多物理性能，特别是电子性能和光学性能。图2 tI16-B₂CO 表明间接带隙半导体材料，带隙为 4.09 eV。本文还研究了 tI16-B₂CO 的带隙与压力之间的关系，tI16-B₂CO 的带隙随着压力的增大而增大，随着压力的增大，tI16-B₂CO 的导带最小能量明显增大。

参考文献：

[1] 李伟源, 孙小伟等. 超硬材料BC2N的一种新亚稳结构及其高压物性预测.《中国科学: 物理学 力学 天文学》, 2019, 7.

[2] Liu, C.; Zhao, Z.S.; Luo, K.; Hu, M.; Ma, M. D.; He, J. L. Superhard orthorhombic phase of B₂CO

compound. *Diam. Relat. Mater.* 2017, 73, 7–92,

[3] Zhou S and Zhao JJ. Two-dimensional B-C-O alloys: a promising class of 2D materials for electronic devices. *Nanoscale* 2016, 8, 8910–8918.

[4] Wang, S.N.; Oganov, A.R.; Esfahani. Novel superhard B-C-O phases predicted from first principles. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18, 1859–1863

基金项目：

陕西省教育厅专项科研计划项目(18JK1178)西藏民族大学重大项目培育计划(18MDZ01)资助。