

ЭЛЕКТРОННАЯ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА НЕТРАДИЦИОННЫХ АЛЛОТРОП УГЛЕРОДА И ПОЛИМОРФ НИТРИДА БОРА

Покропивный В.В.*, Бекенев В.В.

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,

Кржижановского 3, 03142, Киев, Украина

* Fax: 38(044) 4242131 E-mail: pokr@ipms.kiev.ua

Приведен обзор нетрадиционных аллотроп углерода и полиморф нитрида бора, как оригинальных так и известных в литературе, включая аморфный и металлический углерод, карбины, чаоит, "кубический графит", нанотрубчатые кристаллы, Е-фазу, и т.п. Собраны, показаны и проанализированы их структуры, предсказанные теоретически и найденные экспериментально.

Предсказан набор краystalлообразующих фуллереновых кластеров как строительных блоков плотно упакованных кристаллов. Сконструированы их элементарные ячейки с гцк, оцк, гексагональной, алмазной решетками.

Впервые *ab-initio* FLAPW методом рассчитана зонная структура, уравнение состояния, плотности электронных состояний, карты электронной плотности, новых аллотроп углерода и полиморф нитрида бора.

Вычислена электронная структура простого кубического фуллерита ПКФ-С₂₄ и фулборенита ПКФ-В₁₂N₁₂ (рис.1.1). Равновесные межатомные расстояния $a_{CC}=0.1550$ нм и $a_{BN}=0.1537$ нм имеют значения, промежуточные между алмазом (сфалеритным BN) и графитом (h-BN). ПКФ-С₂₄ - алмазоподобный молекулярный диэлектрик или полупроводник с шириной щели 1.6 эВ. Это новый углеродный цеолит сочетающий генетическую пористость и неполяризуемость с высокими механическими свойствами (объемный модуль $V=196$ ГПа, модули упругости $C_{11}=338$ ГПа, $C_{12}=139$ ГПа, $C_{44}=30$ ГПа), химической инертностью и высокой теплопроводностью. Все это указывает на него как на перспективный низко-диэлектрический материал ($\epsilon < 5.7$) для интерконнекторов и подложек интегральных схем.

ПКФ-В₁₂N₁₂ - алмазоподобный молекулярный полуметалл с шириной щели 0.1 эВ.

Фулборенит ПКФ-В₂₄N₂₄ показан на рис.1.2. Его строительные единицы - кластеры В₂₄N₂₄ были обнаружены недавно в масс-спектрах расплавленного дугой BN. Вычислены следующие параметры : равновесный параметр решетки $A=0.73458$ нм, длина В-N связей $a_{BN}=0.1521$ нм, число атомов на элементарную ячейку $Z=48$, плотность $\rho=2.495$ г/см³,

объемный модуль $V=367$ ГПа, ширина щели $\Delta E_g=3.76$ эВ. Сделан вывод что это гетерополярный сверхтвердый полупроводник или диэлектрик.

Вычислена электронная структура гипералмазного фулборенита ГАФ-В₁₂N₁₂ (рис.1.3). Объемный модуль ГАФ-В₁₂N₁₂ вычисленный предварительно без оптимизации геометрии $V=590$ ГПа, оказался выше, чем у алмаза ($V=540$ ГПа). Это новый сверхтвердый нитридборный полупроводниковый фазозит.

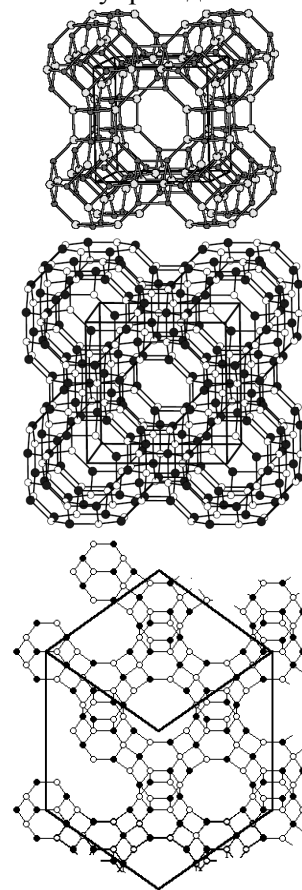


Рис. 1. Элементарные ячейки : 1)ПКФ-В₁₂N₁₂ в котором молекулы В₁₂N₁₂ связаны ковалентно квадратными гранями; 2)ПКФ-В₂₄N₂₄, в котором кластеры В₂₄N₂₄ кополимеризованы октаэдрическими гранями; и 3) ГАФ-В₁₂N₁₂, в котором молекулы В₁₂N₁₂ кополимеризованы гексагональными гранями.