

Proučavanje stabilnosti faza II-VI grupe poluvodiča na visokim tlakovima *ab initio* metodom

Igor Lukačević* i Davor Kirin†

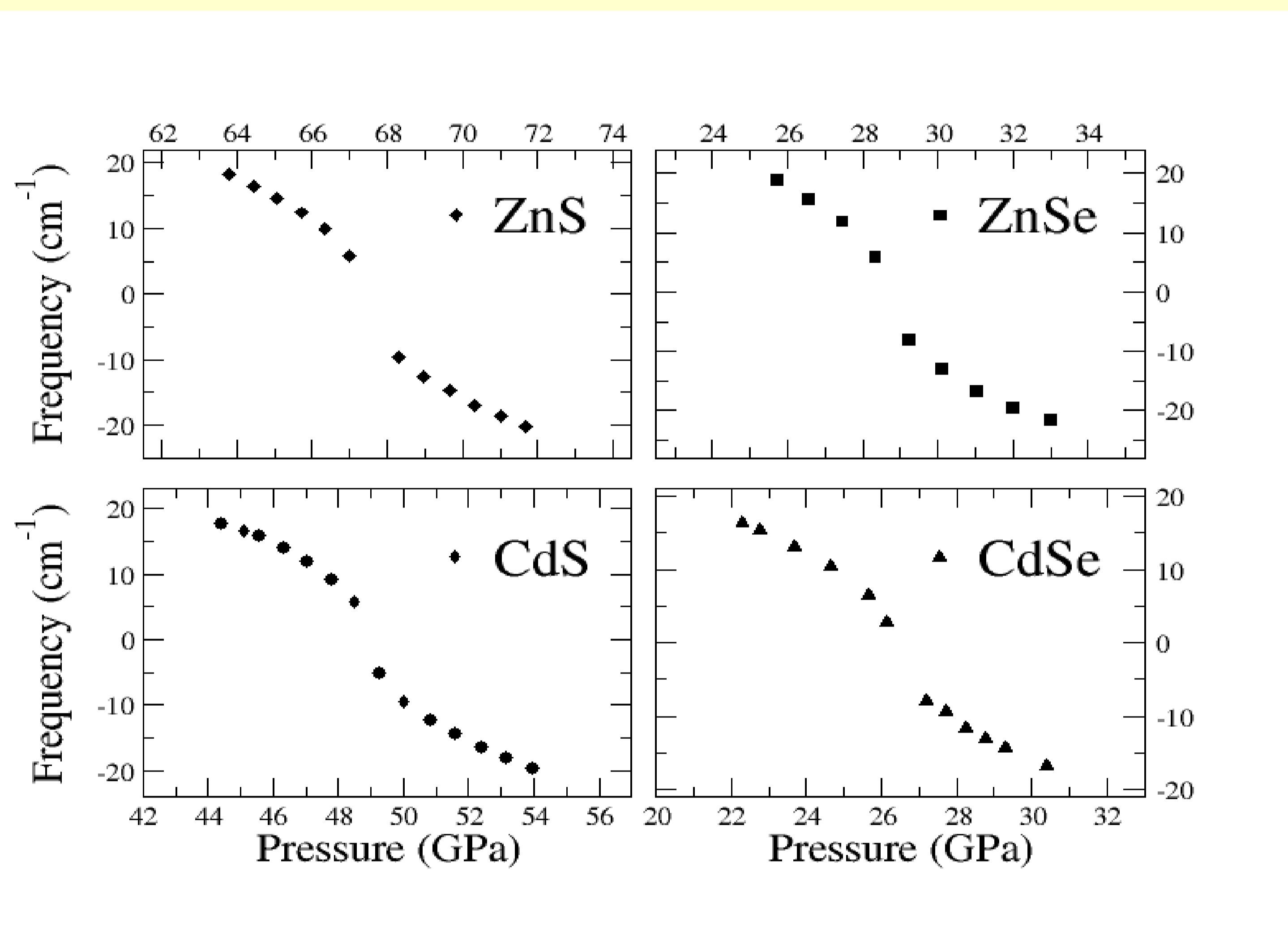
*Odjel za fiziku, Osijek

†Institut Ruđer Bošković, Zagreb

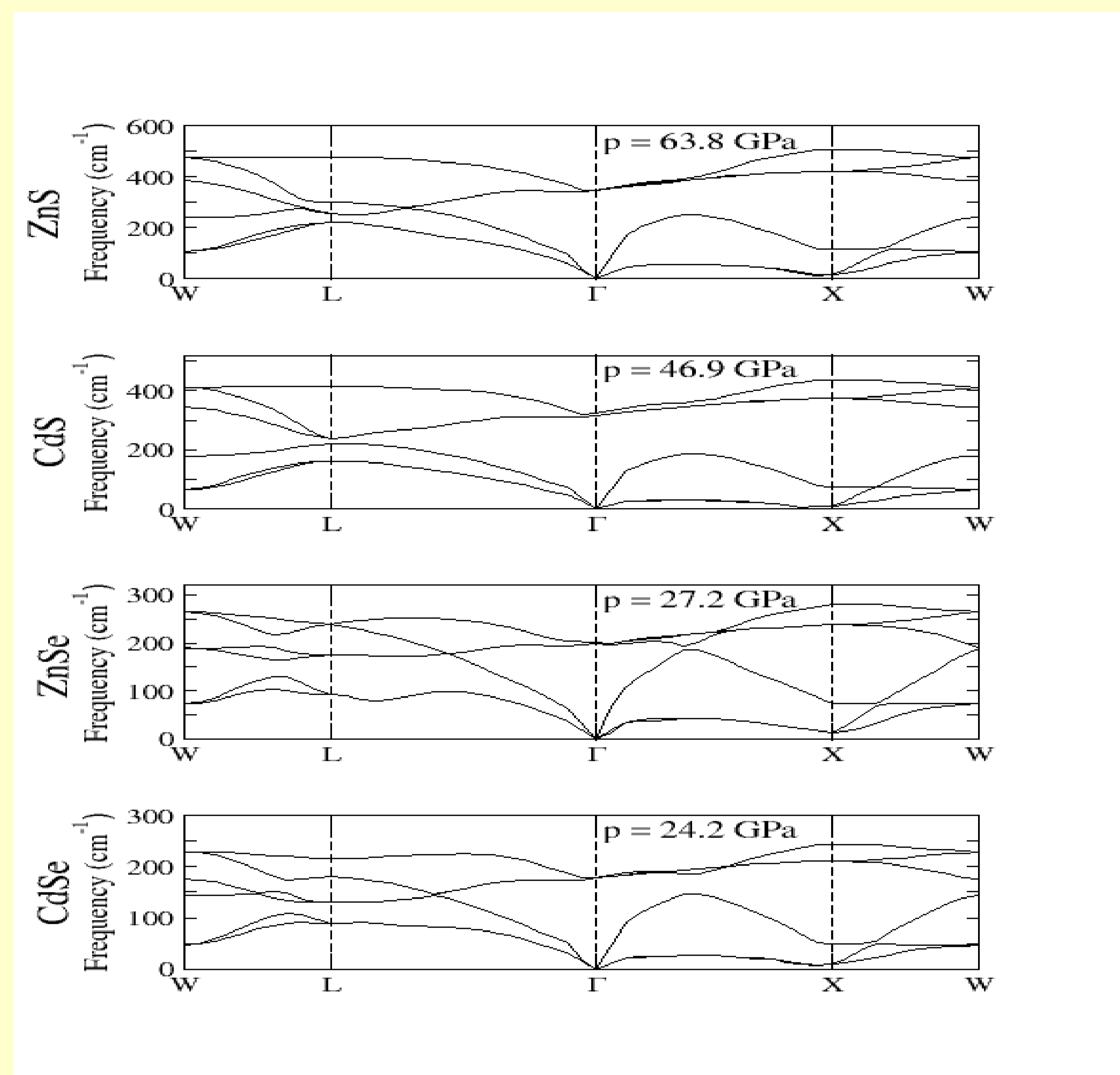


Uvod

Proučavanje faznih prijelaza pod tlakom u kristalima poluvodičima je polje istraživanja koje se u nekoliko zadnjih desetljeća vrlo brzo razvijalo. Eksperimentalno je otkriven velik broj novih faza [2]. U našem radu istraživali smo stabilnost NaCl strukture pod utjecajem tlaka obzirom na visokotlačnu Cmcm strukturu za nekoliko poluvodiča II-VI grupe (ZnS, ZnSe, CdS i CdSe). Računi dinamike rešetke su pokazali da je NaCl struktura nestabilna (slika 1.) obzirom na transversalni akustički mod na rubu Brillouinove zone (X točka).



Slika 1.



Slika 2.

Metoda

Ab initio računi dinamike rešetke su izvršeni pomoću programskog paketa ABINIT [5], koji je zasnovan na teoriji funkcionala gustoće (DFT), uz upotrebu pseudopotencijala.

Rezultati

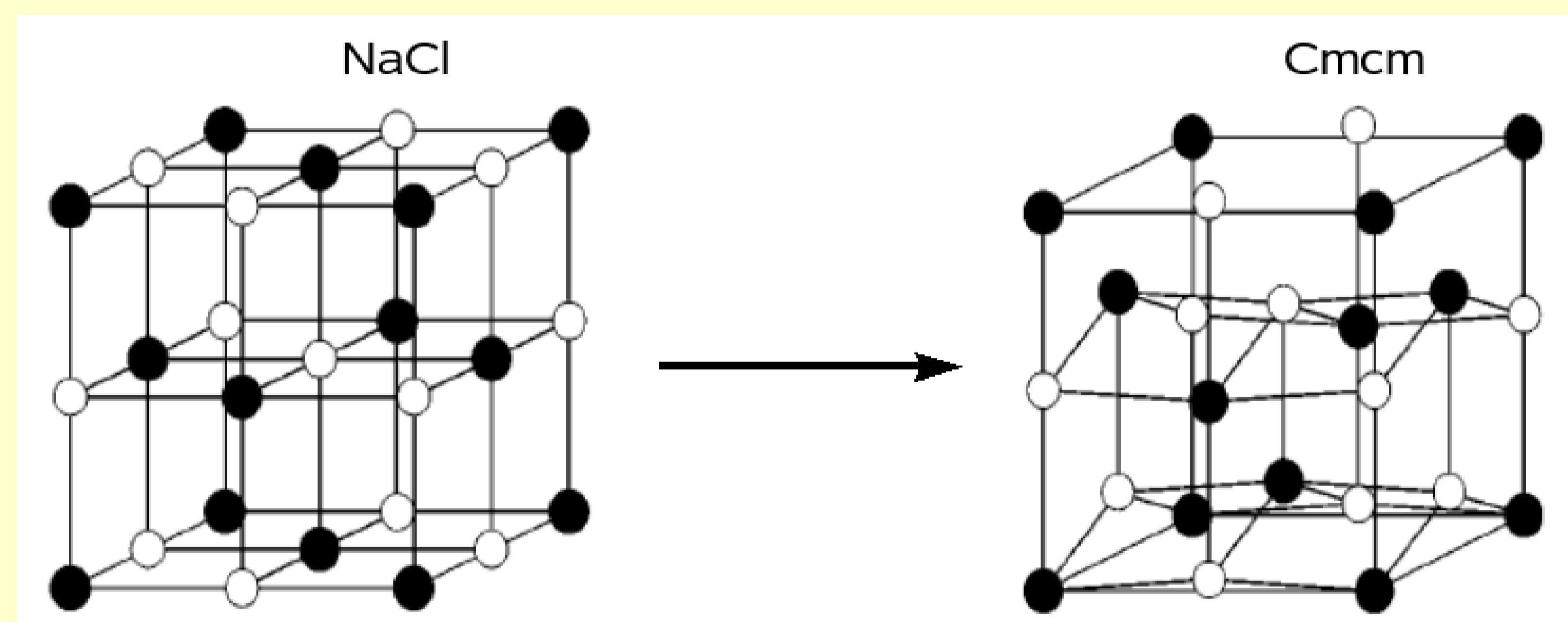
Predstavljeni izračuni [1] daju tlakove prijelaza točnije nego klasična metoda zajedničke tangente [6]. Pošto je, u svim promatranim kristalim, promjena volumena vrlo malena ili jednaka nuli, tlakovi prijelaza su poistovječeni s tlakom na kojem frekvencija transversalnog akustičkog moda na rubu zone ide u nulu (slika 1.).

Izračunati (eksperimentalni) tlakovi prijelaza su: **67** (69) GPa za ZnS, **49** (51) GPa za CdS, **29** (30) GPa za ZnSe, te **26** (27) GPa za CdSe.

Razlika između eksperimentalnih i računom dobivenih tlakova prijelaza je u intervalu 1 do 8 %.

Rasprava

NaCl struktura (slika 3.) je stabilna u određenom intervalu tlakova, te naposljetku prelazi u rombsku Cmcm strukturu (slika 3.) uz vrlo malu promjenu volumena. Slika 2. prikazuje frekvencije fonona na tlakovima blizu, ali ipak manjim, od tlaka faznog prijelaza, potvrđujući stabilnost NaCl faze.



Slika 3.

Literatura

[1] D. Kirin, I. Lukačević, Phys. Rev. B **75**, 172103 (2007).

[2] A. Mujica, A. Rubio, A. Muñoz, R. J. Needs, Rev. Mod. Phys. **75**, 863 (2003).

[3] R. J. Nemes, M. I. McMahon, Semicond. Semimetals **54**, 145 (1998).

[4] M. I. McMahon, R. J. Nemes, Phys. Status Solidi B **198**, 389 (1996).

[5] The ABINIT code is a common project of Universite Catholique de Louvain, Corning Incorporated and other contributors (www.abinit.org).

[6] M. Côté, O. Zakharov, A. Rubio, M. L. Cohen, Phys. Rev. **55**, 13025 (1997).