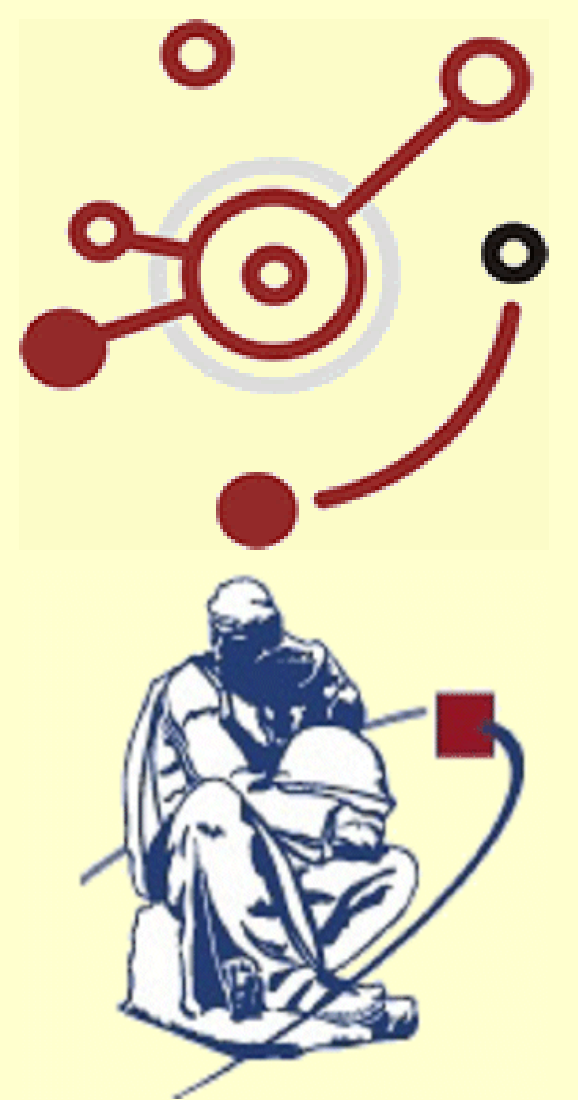


Visokotlačni fazni prijelazi kristala silicija - teorijsko istraživanje -



Igor Lukačević*, Dejan Bošnjaković* i Davor Kirin†

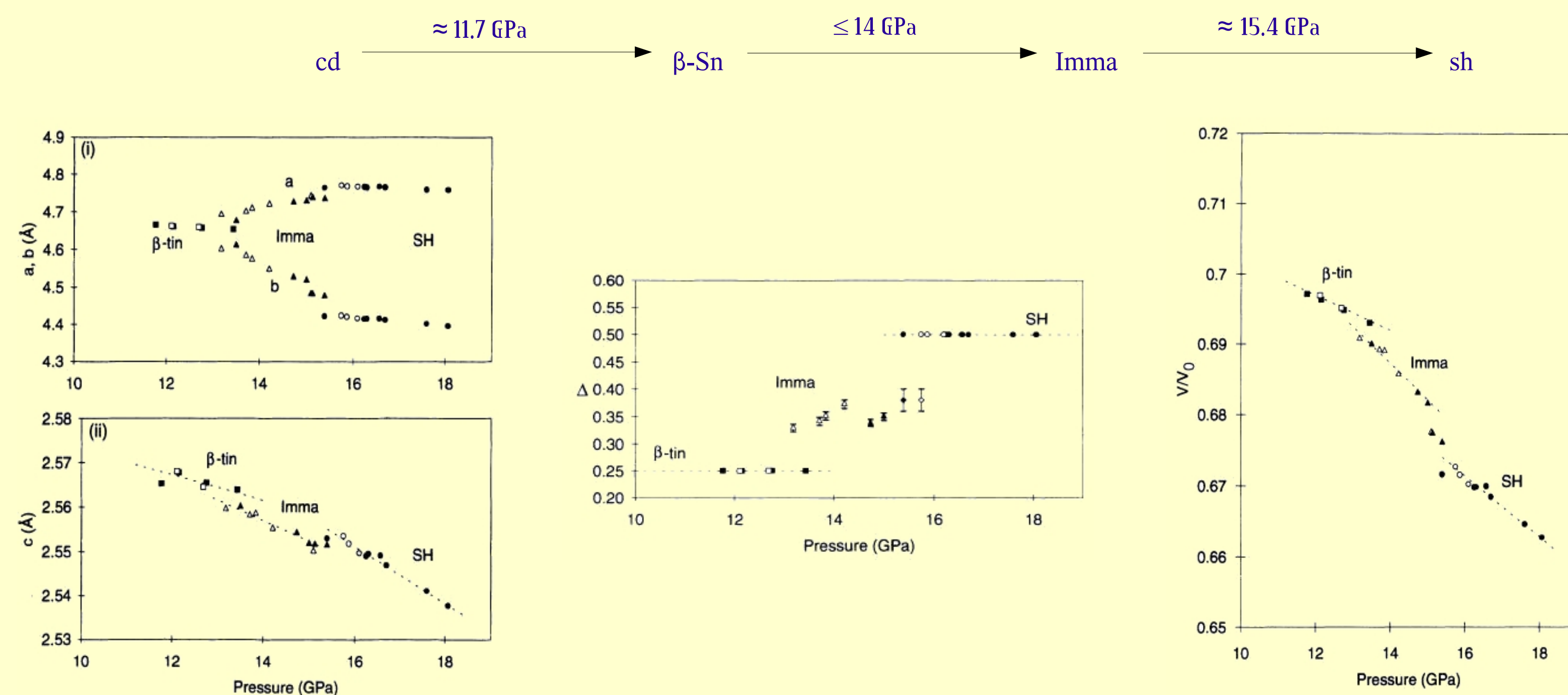
**Odjel za fiziku, Sveučilište J. J. Strossmayer, Osijek*

†*Institut Ruđer Bošković, Zagreb*

Uvod

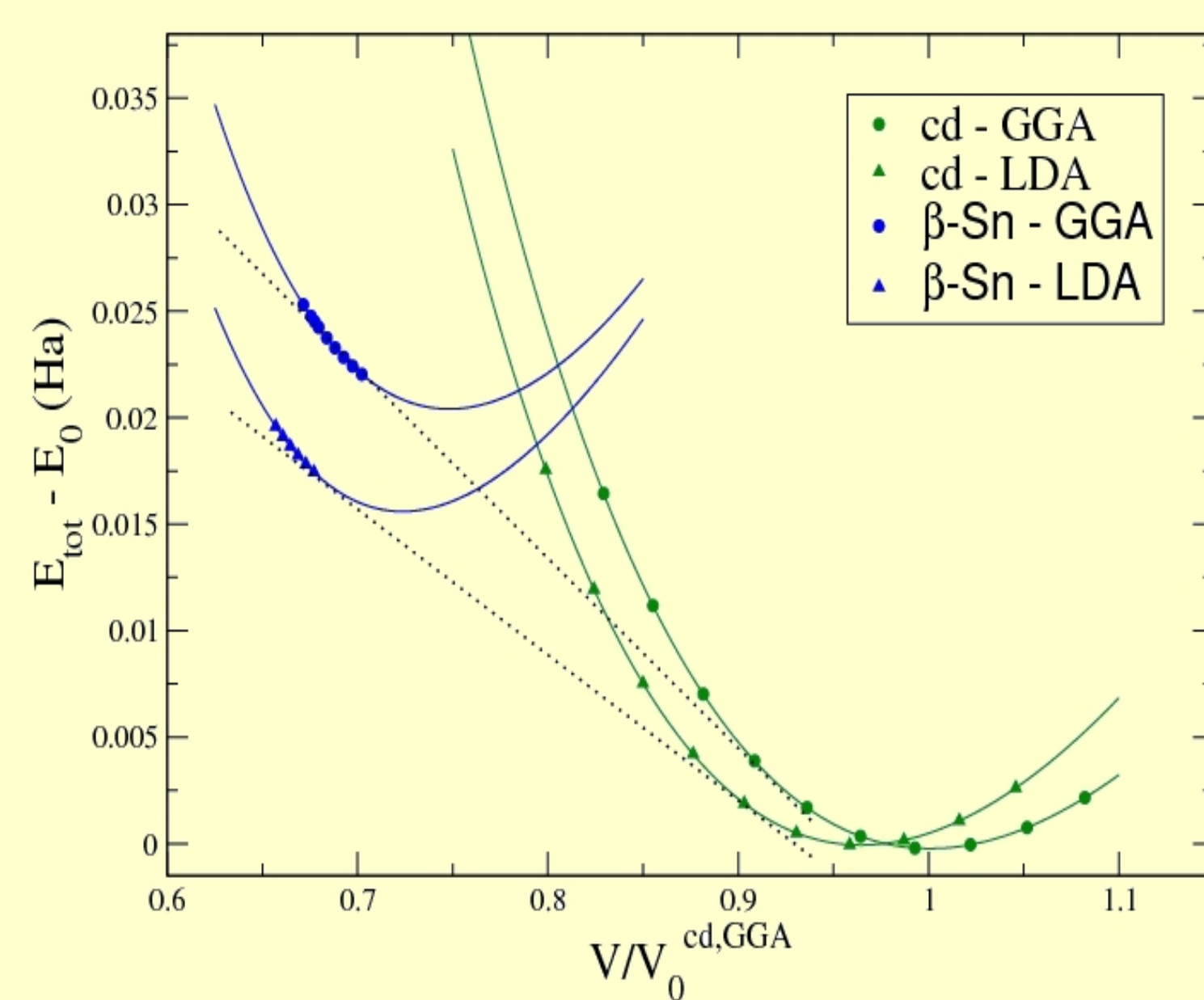
Problematika – teorijski protumačiti mehanizam faznog prijelaza između dvije visokotlačne faze kristala Si: β -Sn i Imma.

Prethodna eksperimentana istraživanja [2] –

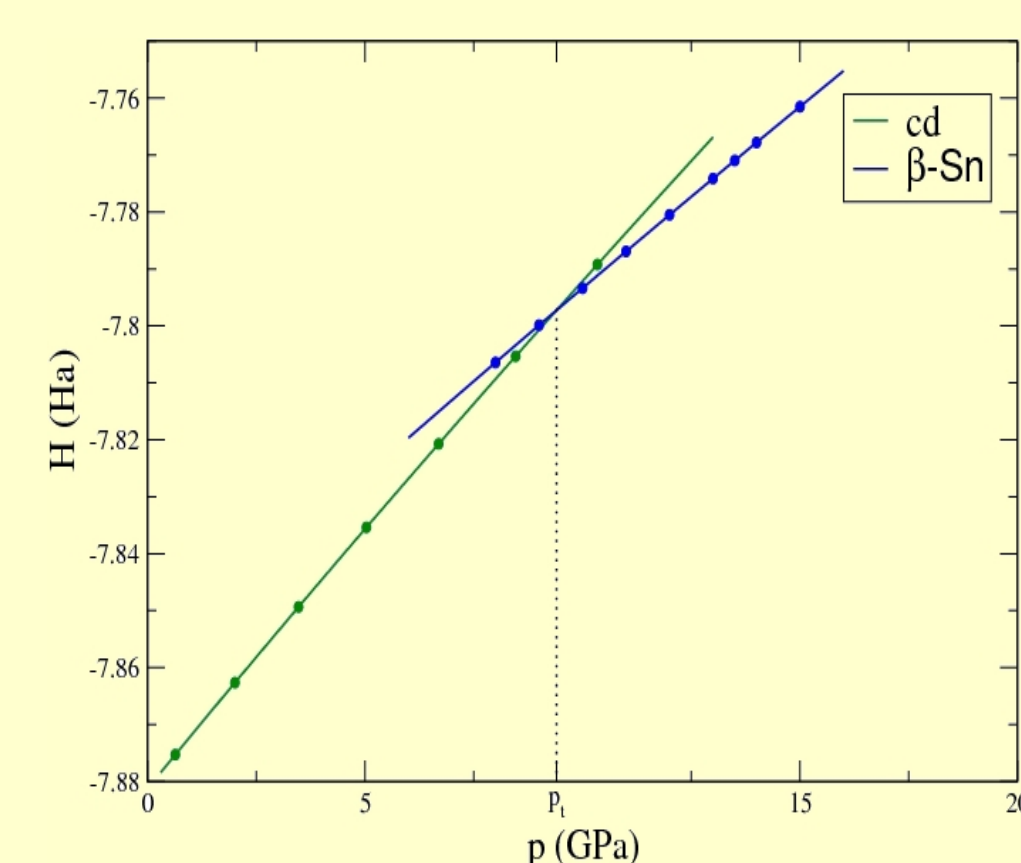


Slika 1. Ovisnost strukturnih parametara i relativnog volumena visokotlačnih faza Si o tlaku. Primjetna je neprekidna promjena strukturnih parametara i zanemariva promjena volumena tijekom prijelaza iz β -Sn u Imma fazu, što ukazuje na fazni prijelaz 2. reda.

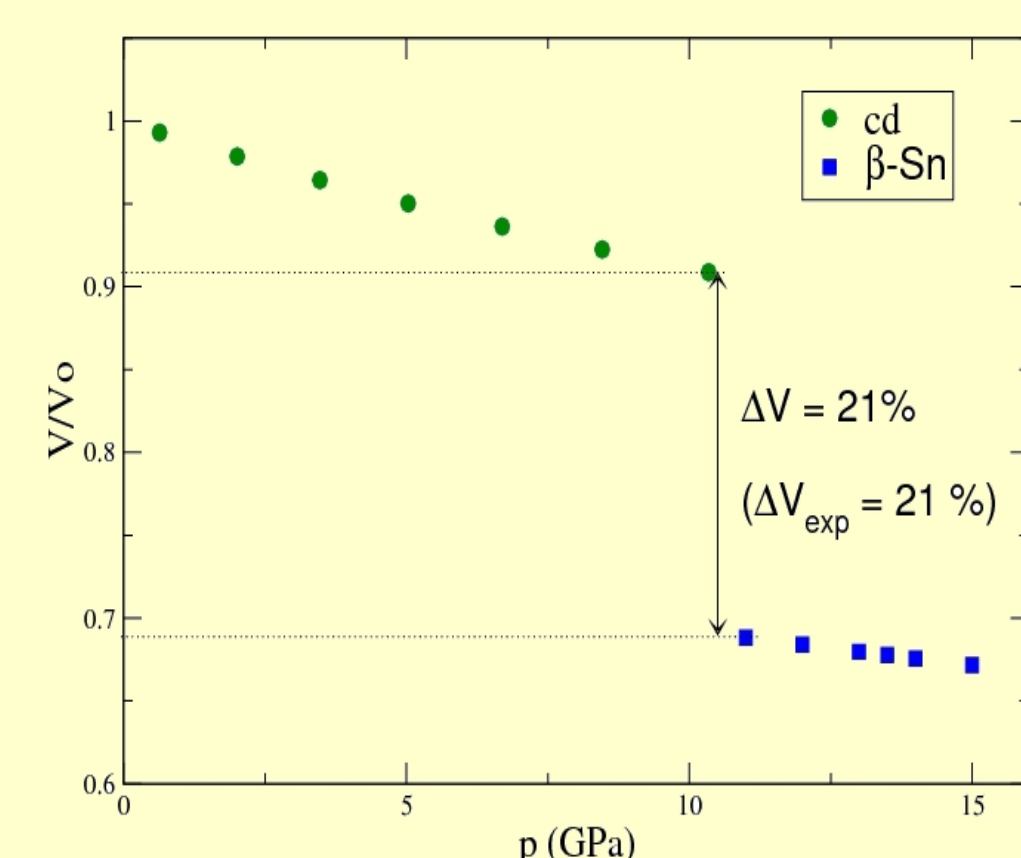
DFT strukturna sistematika



Slika 2. Primjena metode zajedničke tangente na cd i β -Sn faze Si. Utjecaj GGA aproksimacije je izraženiji u cd fazi, gdje su veći gradijenti gustoće elektrona (vidi slike 5(a) i 5(b)).

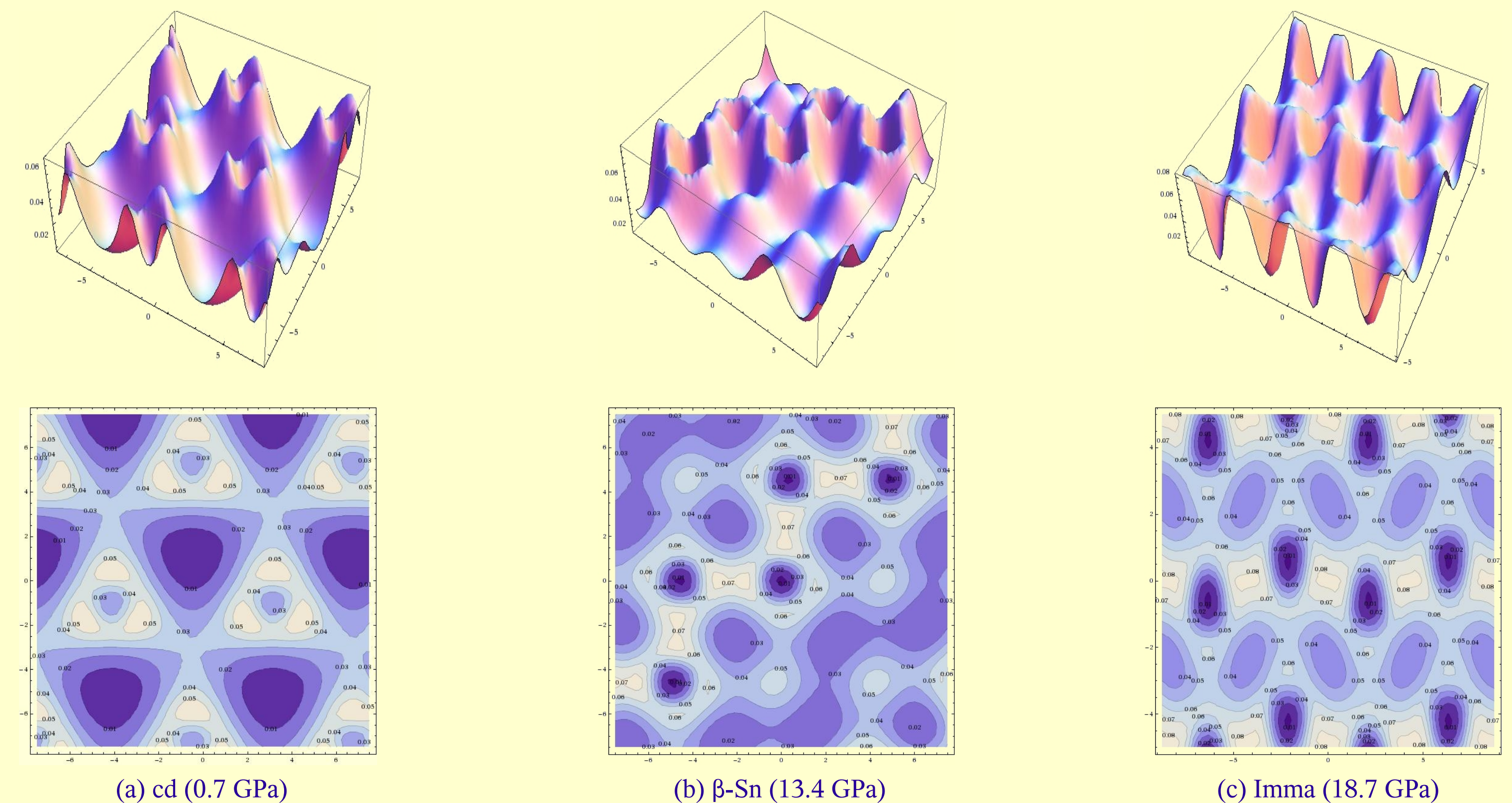


Slika 3. Usporedba entalpija cd i β -Sn faze Si (GGA), koja otkriva tlak faznog prijelaza.

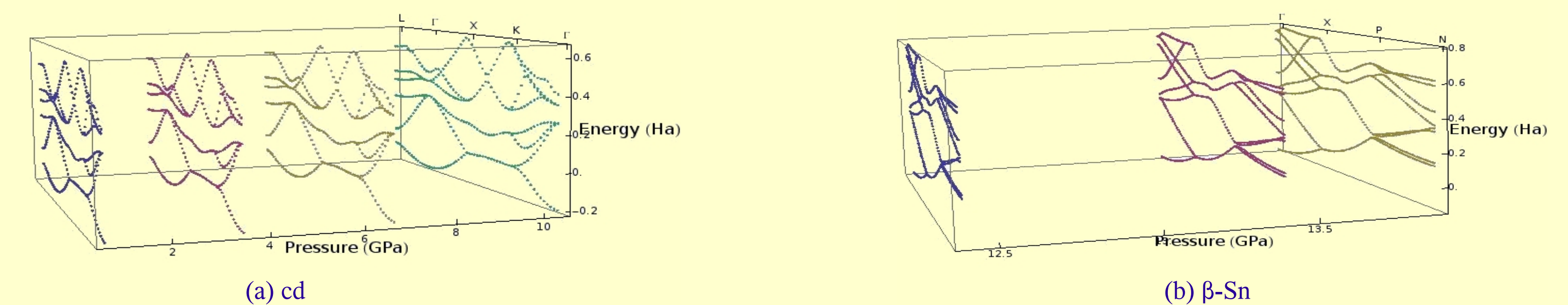


Slika 4. Promjena volumena tijekom faznog prijelaza iz cd u β -Sn fazu Si (GGA). Rezultat ukazuje na činjenicu da se radi o prijelazu prvog reda.

DFT gustoća elektrona i elektronska struktura

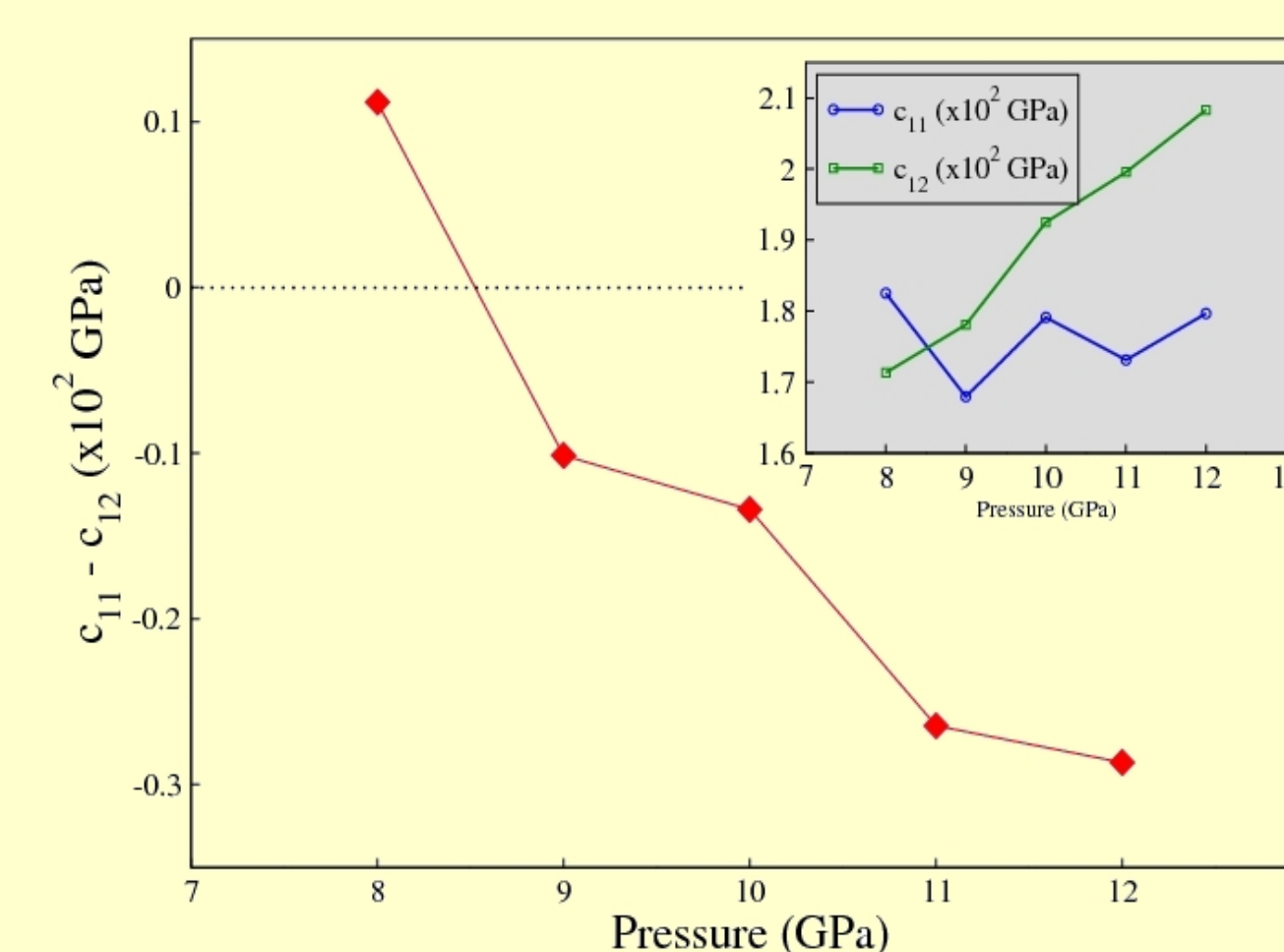


Slika 5. Elektronska gustoća u 3 različite faze kristala Si: cd (a), β -Sn (b) i Imma (c). Uočljiva je pojava metalizacije i smanjenja gustoće na prijelazu iz cd (poluvodič – kovalentna veza) u β -Sn (metal) fazu, dok se na prijelazu iz β -Sn u Imma fazu ne primjećuju značajne promjene gustoće, što ukazuje na neprekidni karakter faznog prijelaza.



Slika 6. Elektronska struktura u cd (a) i β -Sn (b) fazama na različitim tlakovima. Unutar faze ne primjećuju se značajne promjene, no pri faznom prijelazu očito je zatvaranje procjepa između valentne i vodljive vrpce.

DFPT elastične konstante i fononi



Slika 7. Na tlaku između 8 i 9 GPa u β -Sn fazi se pojavljuje mehanička nestabilnost, koja se može primjetiti narušavanjem uvjeta stabilnosti tetragonalne ćelije, izraženog preko razlike elastičnih konstanti: $c_{11} - c_{12} > 0$. Ova činjenica ukazuje da se uistinu radi o feroelastičnom faznom prijelazu [6].

Literatura

- [1] A. Mujica, A. Rubio, A. Muñoz, R. J. Needs, Rev. Mod. Phys. **75**, 863 (2003).
- [2] M. I. McMahon, R. J. Nemes, N. G. Wright, D. R. Allan, Phys. Rev. B **50**, 739 (1994).
- [3] A. Mujica, S. Radescu, A. Muñoz, R. J. Needs, Phys. Stat. Sol. (b), **223**, 379 (2001).
- [4] K. Gaál-Nagy, D. Strauch, Phys. Rev. B, **73**, 014117 (2006).
- [5] The ABINIT code is a common project of Université Catholique de Louvain, Comins Incorporated and other contributors (www.abinit.org).
- [6] R. A. Cowley, Phys. Rev. B, **13**, 4877 (1976).