

A^{8-N}B^N 化合物における構造変化に関する理論的検討

Theoretical study for crystal structures deformation in A^{8-N}B^N compounds

三重大院工, °竹本圭孝, 伊藤智徳, 秋山亨, 中村浩次

Mie Univ., °Takemoto Yoshitaka, Tomonori Ito, Toru Akiyama, Kohji Nakamura

E-mail: 413m613@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】A^{8-N}B^N 化合物は 3 配位から 6 配位までの多様な結晶構造をもつことが知られており, その安定性については多くの研究が行われてきた.[1, 2] これまでに我々は, 3 配位から 6 配位までの構造安定性に対する検討を行い, 3 配位構造の安定化には平衡原子間距離 r_e の減少が関係していることを見出した.[3] 本研究では, 3 配位-4 配位構造間の結晶構造の変化にともなうエネルギー変化と配位数との関係性を明らかにし, 3 配位から 6 配位までの構造安定性について系統的な検討を行う。

【結果および考察】Fig. は C および BN での 3 配位構造(それぞれグラファイトおよび Hexagonal 構造)から 4 配位構造(それぞれ Hexagonal diamond 構造およびウルツ鉱構造)への変化に伴うエネルギーの変化を c/a の関数として示したものである. C および BN は両者とも 3 配位構造が安定であり, 4 配位構造とのエネルギー差は BN(0.22 eV/pair)に比べ C(0.28 eV/pair)が大きい. これは BN に比べ C において平衡原子間距離 r_e が急激に減少し, 3 配位構造面内におけるボンド電荷密度の増大による層間斥力相互作用の増大ならびに c の増大をもたらしているためである.

また, 3 配位構造から 4 配位構造(あるいは 4 配位構造から 3 配位構造)への変化は 5 配位構造を経由しており, そのエネルギー障壁値も BN(0.39 eV/pair) に比べ C(0.66 eV/pair)の方が大きい. 5 配位構造での平衡原子間距離 r_e は BN に比べ C が大きく増大しており, 平衡原子間距離 r_e の変化が c の増大をもたらす 5 配位構造を不安定にしていると考えられる. 以上の結果は, 配位数の変化にともなう平衡原子間距離 r_e の変化が構造安定性を決定するうえで重要であることを示唆している。

[1]T. Ito: Jpn. J. Appl. Phys. **37** (1998) L1217

[2]T. Ito, T. Akiyama, and K. Nakamura, Jpn. J. Appl. Phys. **46** (2007) 345

[3]伊藤 他: 第 60 回応用物理学会春季学術講演会 (2013) 29p-G20-1

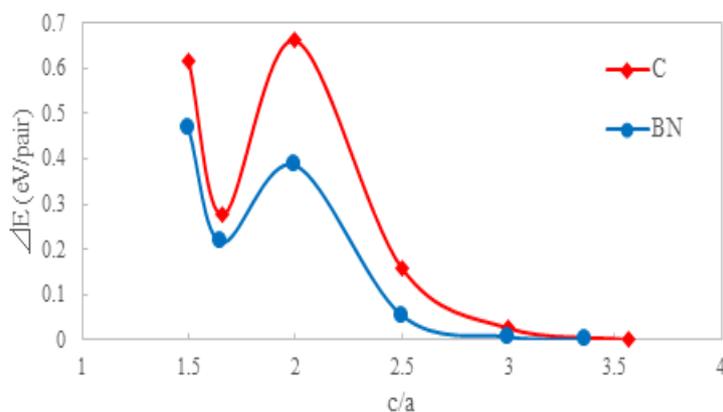


Fig. Total energy difference ΔE (eV/pair) between three-coordinated and four-coordinated structures in C and BN as a function of c/a . Red and Blue plots denote the energy of C and BN, respectively.