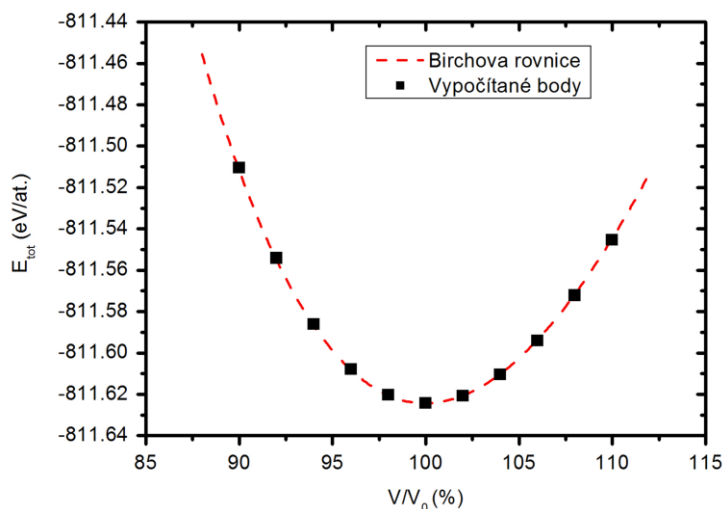


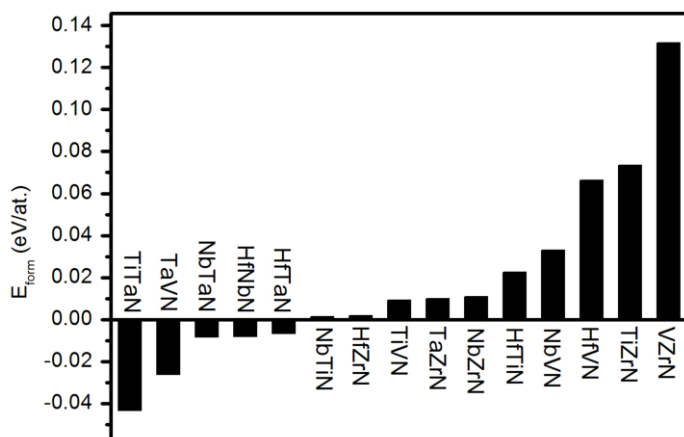
Vlastnosti a elektronová struktura nitridů přechodových kovů

Vít Petřman¹

Binární nitridy přechodových kovů v současnosti nachází díky svým unikátním fyzikálním vlastnostem uplatnění v široké škále oborů a v posledních letech vzrostl zájem o tuhé roztoky a nanokompozity těchto nitridů, které by vzájemnou kombinací jejich vlastností dále zlepšily, a bylo by možné tyto materiály připravovat na míru jejich aplikacím. Tato práce se věnuje systematickému studiu nitridů přechodových kovů IV B a VB skupiny a jejich vlastností pomocí *ab-initio* simulace s použitím programu PWscf (Plane Wave self-consistent field). Mezi hlavní studované vlastnosti patří formovací energie, elastické moduly a elektronová struktura. K určení první skupiny veličin, konkrétně rovnovážné



Obr. 1: Závislost energie systému E_{tot} na objemu primitivní buňky. Body reprezentují hodnoty získané simulací a přerušovaná křivka pak závislost získanou z Birchovy rovnice.



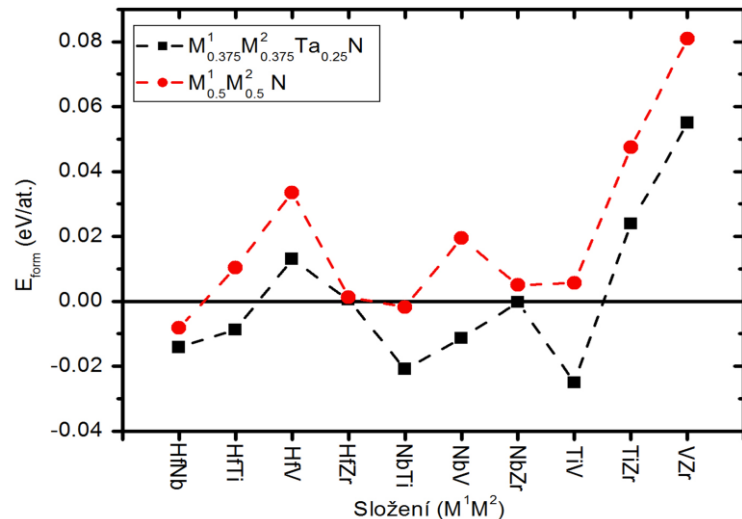
Obr. 2: Formovací energie E_{form} jednotlivých ternárních systémů (složení $M_{0,5}^1M_{0,5}^2N$), která ukazuje na tvorbu tuhých roztoků (záporné hodnoty vlevo) nebo segregaci (kladné hodnoty vpravo).

celkové energie systému v deformovaném stavu. Tímto způsobem lze získat všechny elastické konstanty C_{ij} . Z těchto hodnot byly určeny mezní hodnoty modulu tuhosti dle Voigta a Reusse, stříhový modul G a Youngův modul E . Po získání všech požadovaných veličin pro

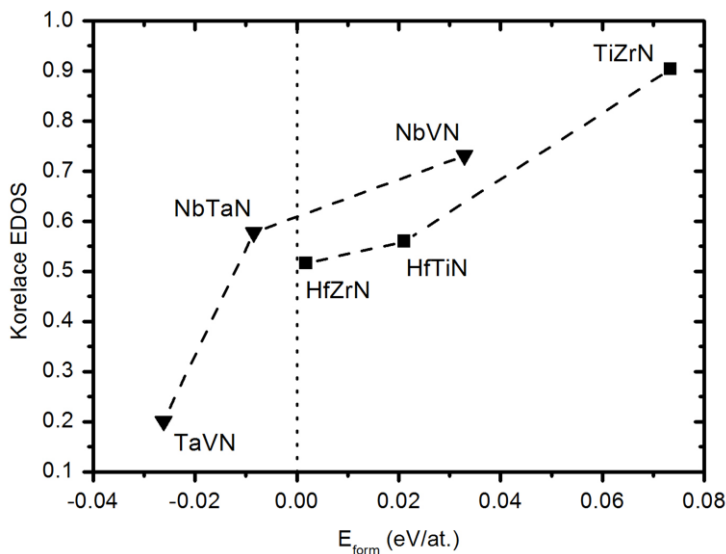
energie systému E_0 , objemu primitivní buňky V_0 , modulu tuhosti B_0 a jeho derivace B_0' , bylo použito metody, kdy se vytvoří buňky v rozmezí 10-20% od předpokládaného rovnovážného objemu $V_{předp.}$ (v této práci 90-110% $V_{předp.}$ s krokem 2%). Pro všechny tyto buňky byla výpočtem zjištěna celková energie (viz Obr.1) a hodnoty hledaných veličin byly pomocí metody nejmenších čtverců získány z Birchovy rovnice. Pro výpočet elastických modulů byla základní buňka deformována transformací primitivních vektorů a následně optimalizována vlnová funkce pro zajištění minimální

¹ student navazujícího studijního programu Aplikované vědy a informatika, obor Aplikovaná fyzika a fyzikální inženýrství, specializace Fyzika technologických procesů, e-mail: vpetrman@students.zcu.cz

binární nitridy bylo možné stejné výpočty provést pro ternární systémy. Nejprve formovací energie (viz Obr. 2), ze kterých je možné usuzovat, které nitridy budou tvořit tuhé roztoky a u kterých bude zřejmě docházet k segregaci jednotlivých složek. Dále byl prozkoumán vliv tantalu na rozpustnost (viz nízké formovací energie systému s tantalem v obrázku 2) přidáním tantalu do ostatních ternárních nitrídů. Bylo prokázáno, že takto lze snížit formovací energie a tím přispět k mísitelnosti zmíněných systémů (viz Obr. 3). Zajímavé



Obr. 3: Vliv přidání tantalu na formovací energii E_{form} ternárních nitrídů. Je patrný pokles pro všechna složení což naznačuje možnost takto zlepšit mísitelnost.



Obr. 4: Závislost (i) hustoty elektronových stavů v nejvyšším obsazeném pásu ve dvou různých binárních nitridech na (ii) formovací energii příslušného ternárního nitridu E_{form} . Je překvapivé, že čím větší korelace, tím menší tendence tvořit tuhý roztok.

výsledky poskytly také výpočty elektronové struktury. Při porovnání korelace hustoty elektronových stavů (EDOS) v nejvyšším obsazeném pásu příslušných binárních nitrídů bylo zjištěno, že s rostoucí korelací překvapivě roste i formovací energie, tj. tendence k segregaci binárních složek (viz Obr. 4). Výsledky poskytují cenný soubor hodnot, které bude možné dále využít při volbě vhodných materiálů pro další simulace, případně experimentální zkoumání. Dále jsou zde prezentovány trendy, které mohou pomoci pochopit vlivy, které se rozhodují o tom, zda materiál bude tvořit tuhý roztok nebo bude docházet k segregaci binárních složek.

Literatura

- P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **21**, (2009) 395502.
 O. Knotek, W.D. Munz, T. Leyendecker, *J. Vac. Sci. Technol. A* **5** (1987) 2173.
 M.J. Mehl, B.M. Klein, D.A. Papaconstantopoulos, *Intermetallic Compounds: Principles and Practice*, John Wiley and Sons, 1994, London.
 J. Musil, *Surf. Coat. Technol.* **125** (2000) 322.
 Y. Okazaki, Y. Ito, K. Kyo, T. Tateishi, *Mat. Sci. Eng. A* **213** (1996) 138.
 M. Takeyama, A. Noya, T. Sase, A. Ohta, K. Sasaki, *J. Vac. Sci. Technol. B* **14** (1996) 674.