



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 109406737 A

(43)申请公布日 2019.03.01

(21)申请号 201811572848.6

(22)申请日 2018.12.21

(71)申请人 齐鲁师范学院

地址 250013 山东省济南市历城区历山路
36号

(72)发明人 步红霞

(74)专利代理机构 北京汇捷知识产权代理事务
所(普通合伙) 11531

代理人 李宏伟

(51) Int. Cl.

G01N 33/00(2006.01)

G06F 17/50(2006.01)

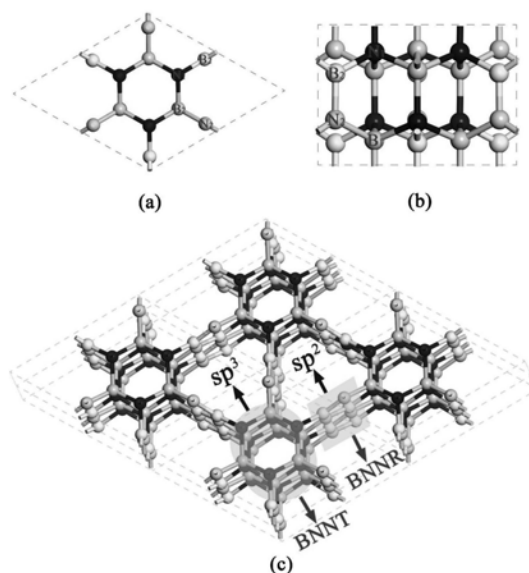
权利要求书1页 说明书2页 附图1页

(54)发明名称

一种BN材料研究方法

(57)摘要

本发明的目的在于提供一种BN材料研究方法, BN材料Hex-(BN)₁₂, 采用基于密度泛函理论的castep程序包, 采用基于PBE广义梯度近似交换关联泛函, 采用BFGS最小化方案优化原子坐标和晶格常数, 为了确认动力学的稳定性, 用castep程序包的线性和非线性响应的方法计算了声子的能带结构, 由于传统的GGA方法常常低估带隙, 又采用了castep里更精确的HSE06交换泛函, 弹性常数的计算采用了胡克定律 $\sigma_i = C_{ij} \epsilon_j$, 杨氏模量和剪切模量用Voigt-Reuss-Hill方法, 硬度分别采用Chen's和Gao's硬度计算模型。



1. 一种BN材料研究方法,其特征在于:本发明所采用的技术方案是BN材料Hex-(BN)₁₂,采用基于密度泛函理论的castep程序包,采用基于PBE广义梯度近似交换关联泛函,采用BFGS最小化方案优化原子坐标和晶格常数,结构优化的精度分别设置总能、最大离子位移、最大力和最大的离子赫尔曼-费曼力为 $5 \times 10^{-6} \text{eV atom}^{-1}$, $5 \times 10^{-4} \text{\AA}$, 0.02GPa 和 0.01eV \AA^{-1} ,为了确认动力学的稳定性,用castep程序包的线性和非线性响应的方法计算了声子的能带结构,由于传统的GGA方法常常低估带隙,又采用了castep里更精确的HSE06交换泛函,弹性常数的计算采用胡克定律 $\sigma_i = C_{ij} \epsilon_j$,杨氏模量和剪切模量用Voigt-Reuss-Hill方法,硬度分别采用Chen's和Gao's硬度计算模型。

2. 按照权利要求1所述一种BN材料研究方法,其特征在于:以平衡态结构为基础,将一系列逐渐增加的力施加到BN材料上,来分析结构对力的响应,在每一步里的设置中,所期望的目标应力分量被设定为一定值,而其它组分保持为零,同时放开晶格基矢和原子位置来优化获得最终的结构和相应的应力,通过这种方法,获得了结构坍塌时的理想强度;为了获得该BN相的相对稳定性,计算了内聚能,并与几个已知的BN相进行了比较。内聚能由方程式: $E_{\text{coh}} = (nE_{\text{B}} + nE_{\text{N}} - E_{(\text{BN})n}) / n$ 获得,其中 E_{B} , E_{N} 和 $E_{(\text{BN})n}$ 分别是单个B原子、N原子和(BN)_n分子的总能量,这里的n等于12。

3. 按照权利要求1所述一种BN材料研究方法,其特征在于:所述BN材料Hex-(BN)₁₂具有不同的键长和键角,原因是其一B和N原子中不同的杂化轨道对键结构有重要影响,其二,B-N键虽然在本质上是共价的,但它们具有离子特性,不同的键长和键角是该结构的能量稳定性低于c-BN和w-BN的原因之一。

4. 按照权利要求1所述一种BN材料研究方法,其特征在于:所述BN材料Hex-(BN)₁₂的硬度介于33-40GPa之间,在外力下,该结构键断裂的顺序是 sp^3-sp^3 , sp^2-sp^3 , 和 sp^2-sp^2 ,GGA和HES06的计算结果表明,该结构是具有3.21/4.42eV间接带隙的半导体,费米面附近的电子态主要来自 sp^2 杂化的原子,通过研究Hex-(BN)₁₂和常见的几种BN结构,发现 sp^3 杂化的B和N原子对强力学性能的贡献较大,而 sp^2 杂化的原子对延展性甚至导电性的贡献较大,该BN结构可以通过高压压缩BN块,BN的纳米片、纳米管和纳米线的方法获得。

一种BN材料研究方法

技术领域

[0001] 本发明属于材料科学技术领域,涉及一种BN材料研究方法。

背景技术

[0002] 基于一种新的BN材料Hex-(BN)₁₂,具有相同数量的sp²和sp³的杂化原子,研究sp²和sp³杂化键对结构、力学和电子性能的影响;

发明内容

[0003] 本发明的目的在于提供一种BN材料研究方法,本发明所采用的技术方案是BN材料Hex-(BN)₁₂,采用基于密度泛函理论的castep程序包,采用基于PBE广义梯度近似交换关联泛函,采用BFGS最小化方案优化原子坐标和晶格常数,结构优化的精度分别设置总能、最大离子位移、最大力和最大的离子赫尔曼-费曼力为 $5 \times 10^{-6} \text{eV atom}^{-1}$, $5 \times 10^{-4} \text{\AA}$, 0.02GPa 和 0.01eV \AA^{-1} ,为了确认动力学的稳定性,用castep程序包的线性和非线性相应的方法计算了声子的能带结构,由于传统的GGA方法常常低估带隙,又采用castep里更精确的HSE06交换泛函。弹性常数的计算采用了胡克定律 $\sigma_i = C_{ij}\epsilon_j$,杨氏模量和剪切模量用Voigt-Reuss-Hill方法,硬度分别采用Chen's和Gao's硬度计算模型。

[0004] 进一步,以平衡态结构为基础,将一系列逐渐增加的力施加到BN材料上,来分析结构对力的响应,在每一步的设置中,所期望的目标应力分量被设定为一定值,而其它组分保持为零,同时放开晶格基矢和原子位置来优化获得最终的结构和相应的应力,通过这种方法,获得了结构坍塌时的理想强度。为了获得该BN相的相对稳定性,计算了内聚能,并与几个已知的BN相进行了比较。内聚能由方程式: $E_{\text{coh}} = (nE_{\text{B}} + nE_{\text{N}} - E_{(\text{BN})n}) / n$ 获得,其中 E_{B} , E_{N} 和 $E_{(\text{BN})n}$ 分别是单个B原子、N原子和(BN)_n分子的总能量,这里的n等于12。

[0005] 进一步,BN材料Hex-(BN)₁₂具有不同的键长和键角,原因是其一B和N原子中不同的杂化轨道对键结构有重要影响,其二,B-N键虽然在本质上是共价的,但它们具有离子特性。不同的键长和键角是该结构的能量稳定性低于c-BN和w-BN的重要原因之一。

[0006] 进一步,BN材料Hex-(BN)₁₂结构的硬度估计介于33-40GPa之间,在外力下,该结构键断裂的顺序是sp³-sp³, sp²-sp³, 和sp²-sp²,GGA和HES06的计算结果表明,该结构是具有3.21/4.42eV间接带隙的半导体,费米面附近的电子态主要来自sp²杂化的原子。通过研究Hex-(BN)₁₂和常见的几种BN结构,发现sp³杂化的B和N原子对强力学性能的贡献较大,而sp²杂化的原子对延展性甚至导电性的贡献较大。该BN结构可以通过高压压缩BN块,BN的纳米片、纳米管和纳米线的方法获得。

附图说明

[0007] 图1是含sp²和sp³杂化键的B和N原子的Hex-(BN)₁₂的原子结构。

具体实施方式

[0008] 下面结合具体实施方式对本发明进行详细说明。

[0009] 本发明一种BN材料研究方法,其中BN材料Hex-(BN)₁₂,采用基于密度泛函理论的castep程序包。采用基于PBE广义梯度近似(GGA)交换关联泛函。平面波函数的截断能设为400eV。倒格空间的布里渊区的k点采用Monkhorst-Pack方法,以0.02/Å区分。采用BFGS最小化方案优化原子坐标和晶格常数。结构优化的精度分别设置总能、最大离子位移、最大力和最大的离子赫尔曼-费曼力为 $5 \times 10^{-6} \text{eV atom}^{-1}$, $5 \times 10^{-4} \text{Å}$, 0.02GPa和0.01 eV Å⁻¹。为了确认动力学的稳定性,用castep程序包的线性和非线性响应的方法计算了声子的能带结构。由于传统的GGA方法常常低估带隙,又采用castep里更精确的HSE06交换泛函。

[0010] 弹性常数的计算采用了胡克定律 $\sigma_i = C_{ij} \epsilon_j$,杨氏模量和剪切模量用Voigt-Reuss-Hill方法,硬度分别采用Chen's和Gao's硬度计算模型。

[0011] 以平衡态结构为基础,将一系列逐渐增加的力施加到BN材料晶体上,来分析结构对力的响应。在每一步里的设置中,所期望的目标应力分量被设定为一定值,而其它组分保持为零。同时放开晶格基矢和原子位置来优化获得最终的结构和相应的应力。通过这种方法,我们获得了结构坍塌时的理想强度。

[0012] 如图1所示是含sp²和sp³杂化键的B和N原子的Hex-(BN)₁₂的原子结构,图1中(a)俯视图,(b)侧视图,(c)由BNNR(sp²杂化键)和BNNT(sp³杂化键)形成的超晶格的示意图。

[0013] 计算的结合能、声子谱和弹性常数确认了该BN化合物结构的稳定性。研究表明,由于具有不同的杂化键以及BN共价键具有离子性的特点,Hex-(BN)₁₂具有不同的键长和键角。这也是该结构的能量稳定性低于c-BN和w-BN的原因之一。该结构的硬度大约介于33-40GPa之间。在外力下,该结构键断裂的顺序是sp³-sp³, sp²-sp³, 和sp²-sp²。GGA和HES06的计算结果表明,该结构具有3.21/4.42eV间接带隙的半导体。费米面附近的电子态主要来自sp²杂化的原子。通过研究Hex-(BN)₁₂和常见的几种BN结构,发现sp³杂化的B和N原子对强力学性能的贡献较大,而sp²杂化的原子对延展性甚至导电性的贡献较大。该新型BN结构可以通过高压压缩BN块,BN的纳米片、纳米管和纳米线的方法获得。

[0014] 为了获得该BN相的相对稳定性,计算了内聚能,并与几个已知的BN相进行了比较。内聚能由方程式定义: $E_{coh} = (nE_B + nE_N - E_{(BN)_n}) / n$,其中E_B, E_N和E_{(BN)_n}分别是单个B原子、N原子和(BN)_n分子的总能量,这里的n等于12。结果表明,在零压下,内聚能与bct BN、1z2-BN、甚至c-BN、w-BN和h-BN相当。这个内聚能值比yne-BN中每BN对约高0.76eV。此外,这些杂化轨道(如前段所述)中不等键长和键角意味着Hex-(BN)₁₂包含应变状态,这可能增加总能量。这就是为什么虽然sp²-杂化是B和N原子在能量上最有利的杂化,但是具有sp²和sp³-杂化的Hex-(BN)₁₂的相对能量稳定性略低于c-BN的原因之一。

[0015] 以上所述仅是对本发明的较佳实施方式而已,并非对本发明作任何形式上的限制,凡是依据本发明的技术实质对以上实施方式所做的任何简单修改,等同变化与修饰,均属于本发明技术方案的范围。

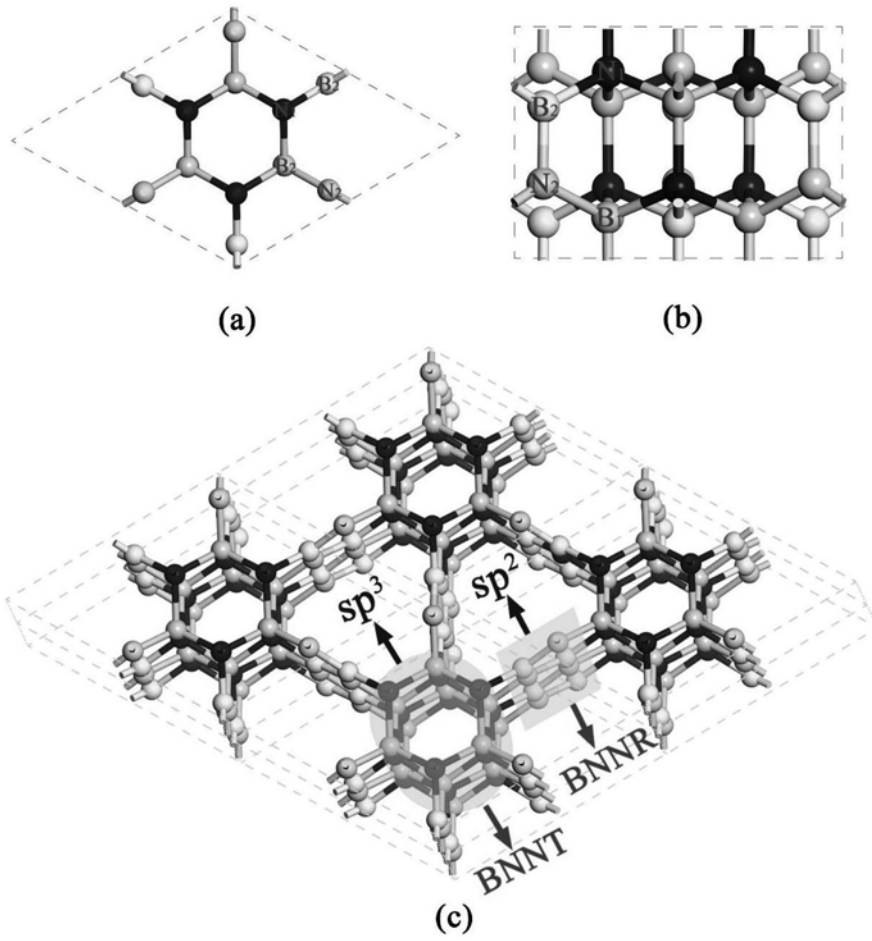


图1