

МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$

*Ромака Л.П.¹, Стадник Ю.В.¹, Ромака В.А.², Горинь А.М.¹,
Демченко П.Ю.¹, Пашкевич В.З.², Рокоманюк М.В.²*

¹Львівський національний університет ім. І. Франка, lyubov.romaka@gmail.com

²Національний університет «Львівська політехніка»

Представлено результати моделювання властивостей напівпровідникового твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, $x=0-0.10$. Моделювання електронної структури $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ проведено методами KKR (пакет програм AkaiKKR) та FLAPW (пакет програм Elk). Для перевірки меж існування твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ методом KKR розраховано зміну значень періоду комірки $a(x)$. Встановлено, що заміщення у позиції $4a$ атомів Lu на атоми Sc веде до зменшення значень періоду елементарної комірки $a(x)$. Така поведінка $a(x)$ $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ зумовлена тим, що атомний радіус Sc ($r_{\text{Sc}}=0.164$ нм) є менший, ніж Lu ($r_{\text{Lu}}=0.173$ нм). При цьому у $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ генеруються структурні дефекти нейтральної природи, оскільки атоми Lu ($5d^16s^2$) та Sc ($3d^14s^2$) розташовані в одній групі Періодичної системи елементів.

Для встановлення енергетичної доцільності існування твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, $x=0-0.10$, у рамках теорії функціоналу густини DFT проведено моделювання зміни ентальпії змішування $\Delta H_{\text{mix}}(x)$. Невисокі значення $\Delta H_{\text{mix}}(x)$ та характер поведінки свідчать про енергетичну вигоду заміщення у позиції $4a$ атомів Lu на Sc та існування твердого розчину.

При дослідженні механізмів електропровідності $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, $x=0-0.10$, розглянуто різні моделі кристалічної та електронної структур. У припущенні, що кристалічна структура $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ упорядкована (кристалографічні позиції зайняті атомами у відповідності до структурного типу MgAgAs [1]), за допомогою пакету програм Elk проведено моделювання розподілу густини електронних станів DOS для LuNiSb та $\text{Lu}_{0.875}\text{Sc}_{0.125}\text{NiSb}$. Показано, що у сполуці LuNiSb рівень Фермі ε_{F} лежить посередині забороненої зони ε_{g} , а її ширина рівна 190.5 меВ. Моделювання DOS для упорядкованого варіанту структури $\text{Lu}_{0.875}\text{Sc}_{0.125}\text{NiSb}$ показує збільшення ширини зони ε_{g} , рівень Фермі ε_{F} , як і у випадку LuNiSb , лежить посередині забороненої зони ε_{g} , а генеровані структурні дефекти мають нейтральну природу.

Розрахунок DOS для неупорядкованого варіанту кристалічної структури $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ проведено із застосуванням моделі, яку можна описати формулою $\text{Lu}_{1-x+y}\text{Sc}_x\text{Ni}_{1-2y}\text{Sb}$. У цій моделі атоми Lu частково переходять у позицію $4c$ атомів Ni і в цій позиції одночасно виникає вакансія (y). При чому, скільки атомів Lu переходить додатково у позицію $4c$ атомів Ni стільки й виникає вакансій у цій позиції. Тобто, якщо атоми Lu за кількості $y=0.01$ переходять у позицію $4c$ атомів Ni, то там виникають додатково вакансії з концентрацією 0.01. Отже, у позиції $4c$ атомів Ni знаходиться: Ni – 0.98, Lu – $y=0.01$, Vac – $y=0.01$.

При такій моделі кристалічної структури сполуки LuNiSb та відсутності вакансій ($y=0$) розрахунок розподілу густини електронних станів DOS свідчить про наявність забороненої зони ε_{g} , а рівень Фермі ε_{F} лежить біля валентної зони ε_{V} . У випадку твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ розрахунок DOS показує наявність забороненої зони ε_{g} , в якій формуються дрібні енергетичні рівні («хвости зон»), що перекриваються із зонами неперервних енергій. При цьому рівень Фермі ε_{F} локалізований на дрібних енергетичних рівнях, що унеможливорює точне визначення глибини його залягання.

Запропонована модель є коректною за незначного числа домішкових атомів Sc, оскільки часткове зайняття атомами Lu позиції $4c$ атомів Ni суттєво деформує структуру з подальшим її розпадом. Результати експериментальних досліджень кінетичних, енергетичних та магнітних властивостей напівпровідникового твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, $x=0-0.10$ покажуть ступінь адекватності запропонованої моделі структури.

1. Ромака В.В., Ромака Л.П., Крайовський В.Я., Стадник Ю.В. Станіди рідкісноземельних та перехідних металів. – Львів: Львівська політехніка, 2015. – 224 с.