О ПОЛЯРНОСТИ СВЯЗЕЙ В ТУГОПЛАВКОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

Чхартишвили Л.С.
Грузинский технический университет
пр. М. Костава, 77, Тбилиси, 0175, Грузия, chkharti2003@yahoo.com

Тугоплавкие диэлектрики обычно являются соединениями, в которых реализуются химические связи ионно-ковалентного или ковалентно-ионного типа. Поэтому для них полярность связывания является важной характеристикой, которая влияет на электронное строение (см., например, случай нитрида бора [1]) и через него – на свойства материала.

Однако зависимости измеряемых физических параметров соединений от эффективных зарядов составляющих атомов настолько сложны, что они практически неопределяемы экспериментально. Что же касается теоретических значений эффективных атомных зарядов, то для них, как показывает, например, анализ данных по нитридам бора, характерен существенный разброс, делающий их недостоверными. Причина заключается в принципяльной невозможности однозначного разделения электронной плотности между атомами элементов соединения [2, 3].

Такая ситуация подталкивает к поиску полуэмпирического решения проблемы. В настоящей работе нами выведено соотношение, позволяющее находить эффективные заряды атомов бинарного соединения по эмпирическим структурному, диэлектрическому и упругому параметрам материала.

Пусть в кристалле диэлектрического соединения, элементарная ячейка которого содержит N пар атомов различных элементов с эффективными зарядами $\pm qe$, деформации, вызванные поляризацией в электрическом поле, являются упругими. Тогда эффективное зарядовое число q вычисляется из соотношения:

$$q = \frac{S}{eN}\sqrt{\varepsilon_0\left(1-\frac{1}{\varepsilon}\right)Y}\,, \qquad (1)$$

где S – площадь сечения элементарной ячейки поперечно направлению приложения внешнего электрического поля, а ε и Y , соответственно, – Модуль Юнга и статическая диэлектрическая проницаемость в этом же направлении.

По предложенной формуле (1) мы провели оценки положительного и отрицательного эффективных зарядов атомов бора B и азота N, соответственно, которых следует приписать трем различным кристаллическим модификациям нитрида бора BN: гексагональному h-BN, кубическому c-BN и вюрцитному w-BN. Результаты представлены в Таблице 1.

Таблица 1

Эффективные атомные зарядове числа в кристаллах нитрида бора

Кристалл	‖ *a*-оси	‖ *c*-оси
h-BN	0.35	0.09
c-BN	0.49	
w-BN	0.76	0.50

Эти числа физически разумны. Впольне естественны и те качественные выводы, которые следуют из них: (1) полярность связей в слоях структуры h-BN существенно сильнее, чем между соседними гексагональными слоями; (2) связи сильнее поляризованы в более плотных модификациях c-BN и w-BN, которых характеризует и более высокие координационные числа; (3) полярности связей в c-BN и по *c*-оси в w-BN практически неразличимы; и (4) полярность связывания в w-BN анизотропна.

Так как полученные эффективные заряды представляются достоверными, они могут быть использованы при уточнении ранних расчетов плотности электронных состояний и молярной энергии связывания в нитридах бора (см., например, [4 – 8]). Аналогичные оценки полярности могут быть проделаны и для других бинарных соединений.

1. C. Prasad, J. D. Dubey. Phys. Status Solidi B, 125 (1984) 629.
2. A. Garcia, M. L. Cohen. Phys. Rev. B 47 (1993) 4215.
3. A. Garcia, M. L. Cohen. Phys. Rev. B 47 (1993) 4221.
4. L. Chkhartishvili, D. Lezhava, O. Tsagareishvili. J. Solid State Chem. 154 (2000) 148.
5. L. S. Chkhartishvili. Phys. Solid State 46 (2004) 2126.
6. L. Chkhartishvili. J. Solid State Chem. 177 (2004) 395.
7. L. Chkhartishvili. Mater. Sci. Ind. J. 2 (2006) 18.
8. L. S. Chkhartishvili. Phys. Solid State 48 (2006) 846.