

03.09.13

Оценки диэлектрических и оптических характеристик бинарных 3D- и 2D-соединений IV группы

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 30 сентября 2022 г.

В окончательной редакции 15 октября 2022 г.

Принята к публикации 20 октября 2022 г.

В модели связывающих орбиталей Харрисона для 3D- и 2D-соединений элементов IV группы получены аналитические выражения для высоко- и низкочастотных диэлектрических восприимчивостей и проницаемостей, линейного электрооптического коэффициента, фотоупругих постоянных и зависимостей диэлектрических проницаемостей от давления.

Ключевые слова: диэлектрические восприимчивость и проницаемость, фотоупругие коэффициенты.

DOI: 10.21883/FTT.2023.02.54288.491

1. Интерес к возможности существования объемных (3D) монокристаллов GeC и SnC и их свойствам возник в начале века [1–3]. С появлением графена и последовавшим затем поиском новых монослойных (2D)-материалов появились работы по двумерным (2D) карбидам германия и олова [4–7]. В работе [8] мы рассмотрели упругие свойства карбидов элементов IV группы, используя для этого модель связывающих орбиталей Харрисона [9–11]. Сравнение полученных в [8] результатов с численными расчетами других авторов и имеющимися экспериментальными данными показало применимость модели к описанию упругости 3D- и 2D-соединений SiC, GeC и SnC.

В настоящей работе мы обратимся ко всему ряду бинарных соединений A_4B_4 . Из этого ряда достаточно хорошо изученным является только карбид кремния [12]. Что же касается других 3D-соединений A_4B_4 , то пока они существуют только в виде сплавов и эпитаксиальных структур [13–16]. Здесь мы рассмотрим диэлектрические и оптические характеристики объемных и графеноподобных соединений A_4B_4 , вновь воспользовавшись моделью связывающих орбиталей Харрисона. Некоторые оценки этих характеристик для кубических монокристаллов SiC, GeC и SnC приведены в работе [17].

2. Начнем с описания диэлектрических свойств 3D-соединений со структурой сфалерита. Определим линейную $\chi^{(1)}$ и квадратичную $\chi^{(2)}$ диэлектрические восприимчивости исходя из разложения поляризации кристалла \mathbf{P} по напряженности электрического поля \mathbf{E} :

$$P_i = \sum_j \chi_{ij}^{(1)} E_j + \sum_{jk} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \dots \quad [18, 19].$$

Тогда в рамках модели связывающих орбиталей можно показать [20,21]¹, что вклады электронной подсистемы в

¹ В работе [21] в последнем сомножителе в правой части формулы (12) вместо $2\alpha_c^2$ должно стоять $2\alpha_p^2$.

эти характеристики равны

$$\chi_1^{el} = \frac{n_e(e\gamma d)^2 \alpha_c^3}{12V_2}, \quad \chi_{14}^{el} = \frac{\sqrt{3}n_e(e\gamma d)^3 \alpha_c^4 \alpha_p}{48V_2^2}, \quad (1)$$

а ионные (решеточные) вклады имеют вид

$$\chi_1^{ion} = \frac{n_e(e\gamma d)^2 \alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{24\alpha_c V_2},$$

$$\chi_{14}^{ion} = \frac{\sqrt{3}n_e(e\gamma d)^3 \alpha_c^2 \alpha_p (1 - 2\alpha_p^2)}{48V_2^2}. \quad (2)$$

Для суммарных значений линейных и квадратичных восприимчивостей получаем следующие выражения:

$$\chi_1 = \chi_1^{el} (1 + \vartheta), \quad \vartheta = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4},$$

$$\chi_{14} = \frac{\sqrt{3}n_e(e\gamma d)^3 \alpha_c^4 \alpha_p^3}{48V_2^2}. \quad (3)$$

Здесь $V_2 = 3.22(\hbar^2/md^2)$ — ковалентная энергия σ -связи sp^3 -орбиталей атомов A и B , где \hbar — приведенная постоянная Планка, m — масса свободного электрона, $d = a\sqrt{3}/4$ — расстояние между ближайшими соседями в структуре сфалерита с постоянной решетки a и, в отличие от [20,21], мы полагаем $V_2 > 0$; $\alpha_c = V_2/\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ и $\alpha_p = \sqrt{1 - \alpha_c^2}$ — ковалентность и полярность связи, $V_3 = |\epsilon_h^A - \epsilon_h^B|/2$ — полярная энергия связи, где $\epsilon_h^{A(B)} = (\epsilon_s^{A(B)} + 3\epsilon_p^{A(B)})/4$ — энергии sp^3 -орбиталей и $\epsilon_s^{A(B)}$ — энергия $s(p)$ -состояния атома $A(B)$; $n_e = 32/a^3$ — плотность электронов, e — элементарный заряд, γ — масштабный множитель, учитывающий поправки на локальное поле и используемый

Таблица 1. Исходные параметры для кубических кристаллов A_4B_4 : расстояние между ближайшими соседями d , ковалентная V_2 и полярная V_3 энергии, ковалентность α_c и полярность α_p связи $A-B$. Верхний ряд значений — расчет по таблицам Манна [11], нижний ряд — расчет по таблицам Хермана–Скиллмана [9]

Параметр	SiC	GeC	SnC	SiGe	SiSn	GeSn
$d, \text{Å}$	1.89	1.99	2.21	2.42	2.60	2.80
V_2, eV	6.87	6.20	5.02	4.19	3.63	3.13
V_3, eV	1.88 1.42	1.93 1.37	2.41 1.77	0.05 0.04	0.53 0.35	0.48 0.39
α_c	0.96 0.98	0.95 0.98	0.90 0.94	1.0 1.0	0.99 1.0	0.99 0.99
α_p	0.26 0.20	0.30 0.22	0.44 0.33	0.01 0.01	0.14 0.10	0.15 0.12

как подгоночный параметр [9,20,21]. Для высокочастотной ϵ_∞ и статической диэлектрических проницаемостей имеем:

$$\epsilon_\infty = 1 + 4\pi\chi_1^{el}, \quad \epsilon_0 = 1 + 4\pi\chi_1. \quad (4)$$

Перейдем к определению параметров задачи, положив $a = 4.36, 4.59$ и 5.11 Å соответственно для кубических соединений SiC, GeC и SnC [3]. Так как значения a для остальных соединений неизвестны, будем определять их величину исходя из атомных радиусов r_a , но учтем, что $a(AB) < r_a(A) + r_a(B)$. Взяв r_a из [22] и оценив среднее для карбидов отношение $a(XC)/(r_a(X) + r_a(C)) \approx 0.94$ ($X = \text{Si, Ge, Sn}$), получим для SiGe, SiSn и GeSn значения d , представленные в табл. 1. Для вычисления полярной энергии V_3 воспользуемся таблицами атомных термов $\epsilon_{s(p)}^{A(B)}$ Манна [11] и Хермана–Скиллмана [9]. Из рассмотрения полученных таким путем значений параметров (см. табл. 1) следует, во-первых, что в ряду SiC \rightarrow GeSn длина межатомной связи d увеличивается. Во-вторых, все соединения A_4B_4 можно разбить на группу I, куда входят карбиды XC , и группу II, содержащую SiGe, SiSn и GeSn. В обеих группах при переходе от первого соединения к последнему полярность связи α_p возрастает, хотя соединения группы II можно считать практически гомополярными. И, наконец, масштабный множитель γ можно оценить по экспериментальным данным [23] для 3C-SiC: $\epsilon_\infty = 6.52$ и $\epsilon_0 = 9.72$. Выбирая для подгонки ϵ_∞ , получим значение $\gamma = 1.44$, которое и будем использовать для всех остальных соединений 3C- A_4B_4 .

Для дальнейшего анализа удобно переписать выражения для χ_1^{el} и χ_{14} , в виде $\chi_1^{el} \approx 0.26(d\alpha_c^3)$ и $\chi_{14} \approx 2.01(d^4\alpha_c^2\alpha_p^3) \cdot 10^{-8} \text{ CGSE}$ (или $\chi_{14} \approx 0.67(d^4\alpha_c^2\alpha_p^3) \cdot 10^{-12} \text{ m/V}$ в ед. SI), где d измеряется в Å. Результаты расчета представлены в табл. 2. Для карбидов значения χ_1^{el}, χ_1 и ϵ_∞ мало различаются, так как уменьшение ковалентности α_c в ряду SiC \rightarrow SnC

компенсируется ростом d . Увеличение ϵ_0 в том же ряду связано с ростом множителя ϑ . Отметим, что полученные нами значения ϵ_0 являются, по-видимому, заниженными. Во всяком случае, так обстоит дело для 3C-SiC.

Малость квадратичных восприимчивостей χ_{14}^{el} и χ_{14} соединений A_4B_4 по сравнению с полупроводниками A_3B_5 и A_2B_6 (см. например, табл. 5.1 в [9]) объясняется малой полярностью связей α_p . Рост χ_{14}^{el} и χ_{14} в группах I и II (при переходе от первого соединения к последнему) связан с увеличением как α_p , так и d . Среди рассмотренных соединений наибольшие значения χ_{14}^{el} и χ_{14} соответствуют 3C-SnC. Это легко объяснимо, так как максимальное значение χ_{14}^{el} имеет место при $\alpha_c^* = \sqrt{4/5}$ и $\alpha_p^* = \sqrt{1/5}$, что практически совпадает с характеристиками связи Sn–C. Максимум суммарной (низкочастотной) восприимчивости χ_{14} реализуется при $\alpha_c^* = \sqrt{2/5}$ и $\alpha_p^* = \sqrt{3/5}$.

Следует подчеркнуть, что при появлении в формулах высоких степеней α_c и α_p результаты расчетов по таблицам Манна и Хермана–Скиллмана заметно отличаются. Необходимо также отметить, что в настоящей работе игнорировали металличность межатомных связей [9,10], учет которой, вообще говоря, может заметно сказаться на результатах расчета [20,21].

3. Перейдем к рассмотрению оптических свойств кубических кристаллов. Линейный электрооптический коэффициент r_{41} , описывающий изменение показателя преломления $n = \sqrt{\epsilon_\infty}$ нецентросимметричных кристаллов в низкочастотном электрическом поле, определяется,

Таблица 2. Значения линейных восприимчивостей χ_1^{el}, χ_1 , высокочастотной ϵ_∞ и статической ϵ_0 диэлектрических проницаемостей, множителя ϑ и квадратичных диэлектрических восприимчивостей $\chi_{14}^{el}, \chi_{14}$, для кубических кристаллов A_4B_4 . Верхний ряд значений — расчет по таблицам Манна [11], нижний ряд — расчет по таблицам Хермана–Скиллмана [9]

Параметр	SiC	GeC	SnC	SiGe	SiSn	GeSn
χ_1^{el}	0.43 0.46	0.44 0.49	0.42 0.48	0.63 0.63	0.66 0.68	0.71 0.71
χ_1	0.48 0.49	0.51 0.53	0.58 0.57	0.63 0.63	0.68 0.69	0.73 0.73
ϵ_∞	6.46 6.81	6.57 7.11	6.28 7.00	8.55 8.55	9.24 9.49	9.48 9.48
ϑ	0.11 0.06	0.15 0.08	0.39 0.19	0 0	0.03 0.015	0.03 0.02
ϵ_0	7.00 7.13	7.39 7.63	8.29 8.18	8.55 8.55	9.54 9.67	10.23 10.12
$\chi_{14}^{el}, 10^{-12} \text{ m/V}$	1.86 1.60	2.54 2.12	4.59 4.08	0 0	3.00 2.33	5.95 4.76
$\chi_{14}, 10^{-12} \text{ m/V}$	0.14 0.07	0.25 0.10	1.10 0.50	0 0	0.06 0.02	0.14 0.07

согласно [18–21], как

$$r_{41} = -4\pi\chi_{14}/n^4. \quad (5)$$

Результаты расчета, представленные в табл. 3, показывают, что характер изменения коэффициентов $r_{41}^{el} = -4\pi\chi_{14}^{el}/n^4$ и r_{41} в ряду A_4B_4 определяется квадратичными восприимчивостями χ_{14}^{el} и χ_{14} . Отметим крайне низкие значения $|r_{41}^{el}|$ и $|r_{41}|$ кубических кристаллов A_4B_4 по сравнению с другими материалами (см., например, табл. 77.2 в [19]).

Для кубических 3D-соединений фотоупругие постоянные p_{ij} , определяющие влияние механических напряжений на распространение света в кристаллической среде [20,21], имеют вид

$$p_{11} = \xi \left(1 + \frac{8\lambda}{8 + \lambda} \right), \quad p_{12} = \xi \left(1 - \frac{4\lambda}{8 + \lambda} \right),$$

$$p_{44} = \frac{99\xi\lambda}{(8 + \lambda)(8 + 3\lambda)}, \quad (6)$$

где $\xi = -2\eta(\varepsilon_\infty - 1)/3\varepsilon_\infty^2$, $\eta = 2(1 - 3\alpha_p^2)$, $\lambda = 0.85$ [24]. Полученные в результате расчета значения p_{ij} (табл. 3) близки к фотоупругим постоянным алмаза $p_{11} = -0.31$, $p_{12} = -0.09$ и $p_{44} = -0.12$ (см. табл. 77.1 в [19]). Незначительный спад значений $|p_{ij}|$ в рядах SiC \rightarrow SnC и SiGe \rightarrow GeSn объясняется ростом полярности связей.

4. Обратимся теперь к зависимостям диэлектрических проницаемостей ε_∞ и ε_0 кубических кристаллов от давления P . В работе [25] показано, что

$$\frac{\partial\varepsilon_\infty}{\partial P} = -\eta \frac{\varepsilon_\infty - 1}{3B}, \quad \frac{\partial\varepsilon_0}{\partial P} = (\varepsilon_\infty - 1) \frac{\partial\vartheta}{\partial P} + (1 + \vartheta) \frac{\partial\varepsilon_\infty}{\partial P},$$

$$\frac{\partial\vartheta}{\partial P} = -\frac{2\alpha_p^2}{\alpha_c^2 B} \left(1 + \frac{2\alpha_p^2}{3\alpha_c^2} \right), \quad (7)$$

где B — объемный модуль сжатия. В модели связывающих орбиталей Харрисона $B = 2\alpha_c^3 V_2 / \sqrt{3} d^3$ [9]. Результаты расчета представлены в табл. 3. Следует подчеркнуть, что приведенные в табл. 3 значения $|\partial\varepsilon_\infty/\partial P|$ и $|\partial\varepsilon_0/\partial P|$ являются оценками по максимуму, так как использованный в [8] вариант расчета (без учета короткодействующего отталкивания) занижает величину объемного модуля сжатия. Действительно, для 3C-SiC по данным [26] (см. табл. 4.6) имеем $B = 246$ GPa, что в ~ 1.5 раза превышает полученный нами результат. Поэтому мы добавили в табл. 3 результаты расчета безразмерных производных $(\partial\varepsilon_\infty/\partial P)B$ и $(\partial\varepsilon_0/\partial P)B$, позволяющих по известным (из эксперимента или расчетов из первых принципов) значениям объемного модуля сжатия определить величины $\partial\varepsilon_\infty/\partial P$ и $\partial\varepsilon_0/\partial P$.

5. Перейдем к описанию свойств 2D-соединений A_4B_4 . Для электронного $\bar{\chi}_1^{el}$ и решеточного $\bar{\chi}_1^{ion}$ вкладов в линейную диэлектрическую восприимчивость $\bar{\chi}_1$ графеноподобных структур (in-plane вклады) в работе [29] были получены следующие выражения:

$$\bar{\chi}_1^{el} = \frac{(e\bar{\gamma})^2 \bar{\alpha}_c^3}{\sqrt{3}\bar{V}_2 \bar{h}}, \quad \bar{\chi}_1^{ion} = \frac{2(e\bar{\gamma})^2 \bar{\alpha}_p^2 (1 + 2\bar{\alpha}_c^2)}{\sqrt{3}\bar{k}_0 \bar{d}^2 \bar{h}}, \quad (8)$$

Таблица 3. Значения линейных электрооптических коэффициентов r_{14}^{el} , r_{41} , упругооптических постоянных p_{ij} , параметров $(\partial\varepsilon_\infty/\partial P)B$ и $(\partial\varepsilon_0/\partial P)B$, объемных модулей сжатия B и производных диэлектрических проницаемостей по давлению $\partial\varepsilon_\infty/\partial P$ и $\partial\varepsilon_0/\partial P$ для кубических кристаллов A_4B_4 . Верхний ряд значений — расчет по таблицам Манна [11], нижний ряд — расчет по таблицам Хермана–Скиллмана [9]

Параметр	SiC	GeC	SnC	SiGe	SiSn	GeSn
$-r_{14}^{el}, 10^{-12}$ m/V	0.55 0.40	0.74 0.53	1.46 1.05	0 0	0.50 0.33	0.87 0.68
$-r_{41}, 10^{-12}$ m/V	0.04 0.02	0.07 0.02	0.35 0.13	0 0	0.01 0	0.02 0.01
$-p_{11}$	0.25 0.26	0.22 0.24	0.14 0.19	0.24 0.24	0.21 0.21	0.21 0.21
$-p_{12}$	0.08 0.08	0.07 0.08	0.04 0.06	0.08 0.08	0.07 0.07	0.07 0.07
$-p_{44}$	0.13 0.13	0.11 0.12	0.07 0.10	0.12 0.12	0.11 0.11	0.11 0.11
$-(\partial\varepsilon_\infty/\partial P)B$	2.89 3.41	2.71 3.48	1.36 2.70	5.03 5.03	5.16 5.49	5.25 5.40
$-(\partial\varepsilon_0/\partial P)B$	4.03 4.41	4.29 4.37	4.56 4.83	5.03 5.03	5.64 5.74	5.83 5.76
B , GPa	166 177	124 137	64 72	132 132	96 99	72 72
$-\partial\varepsilon_\infty/\partial P, 10^{-2}$ GPa $^{-1}$	1.74 1.93	2.19 2.55	2.13 3.75	3.81 3.81	5.38 5.55	7.29 7.50
$-\partial\varepsilon_0/\partial P, 10^{-2}$ GPa $^{-1}$	2.43 2.49	3.46 3.19	7.13 6.71	3.81 3.81	5.88 5.61	10.1 10.4

где силовая константа центрального взаимодействия ближайших соседей

$$\bar{k}_0 = \frac{4\bar{\alpha}_c \bar{V}_2 (2\bar{\alpha}_c^2 - 1)}{\bar{d}^2} \quad (9)$$

и мы вновь пренебрегли металличностью связей. В этих формулах черта над символом указывает, что мы имеем дело с 2D-структурой, \bar{h} — „толщина“ монослоя². В расчетах [29] мы полагали $\bar{h} = \bar{d}$ и $\bar{\gamma} = 1$. В последнее время практически общепринято приравнивать \bar{h} к межплоскостному расстоянию в графите, равному 3.35 Å [23]. Положим для простоты $\bar{h}/\bar{\gamma}^2 = \bar{d}$. Принимая для 2D SiC значение $\bar{d} = 1.79$ Å [29], получим $\bar{\gamma} = 1.37$, что весьма близко к значению $\gamma = 1.44$ для 3C-SiC. Далее, для sp^2 -гибридизации ковалентная энергия равна $\bar{V}_2 = 3.26(\hbar^2/md^2)$ [10], а полярная

² Параметр \bar{h} вводится для того, чтобы размерности физических идентичных характеристик для 3D- и 2D-структур были бы одинаковыми, что удобно в первую очередь для сравнения. Насколько известно автору, впервые „толщина“ была введена при рассмотрении упругости графена, откуда и появилось ставшее общим утверждение о том, что его модуль Юнга ~ 1 TPa (без введения \bar{h} размерность модулей упругости 2D-структур есть N/m).

энергия $\bar{V}_3 = |\bar{\epsilon}_h^X - \bar{\epsilon}_h^C|/2$, где $\bar{\epsilon}_h^{X(C)} = (\epsilon_s^{X(C)} + 2\epsilon_p^{X(C)})/3$. Численные значения межатомных расстояний \bar{d} [9], энергий \bar{V}_2, \bar{V}_3 , силовой константы \bar{k}_0 , ковалентностей $\bar{\alpha}_c$ и полярностей связей $\bar{\alpha}_p$ приведены в табл. 4, а значения характеристик (8), (9), $\bar{\epsilon}_\infty = 1 + 4\pi\bar{\chi}_1^{el}$ и $\bar{\epsilon}_0 = 1 + 4\pi(\bar{\chi}_1^{el} + \bar{\chi}_1^{ion})$ — в табл. 5. Из табл. 5 следует, что для средних значений диэлектрических постоянных карбидов имеем $\bar{\epsilon}_\infty \sim 8$ и $\bar{\epsilon}_0 \sim 9$, для соединений II группы $\bar{\epsilon}_\infty \sim \bar{\epsilon}_0 \sim 11-12$.

Так как какая-либо информация о диэлектрических характеристиках 2D-соединений A_4B_4 отсутствует, приведем данные для других материалов. Так, например, по данным разных авторов (см. [30,31]), для графена значения лежат в интервале 2–15. Для гексагонального 2D-нитрида бора (h-BN) имеем $\bar{\epsilon}_\infty = 4.96, 4.97$ и $\bar{\epsilon}_0 = 6.82, 6.86$, тогда как для объемных образцов $\epsilon_\infty = 4.98$ и $\epsilon_0 = 6.93$ [32]. Данные по халькогенидам переходных металлов приведены в [32]: например, для 2D WS_2 имеем $\bar{\epsilon}_\infty = 123.6$ и $\bar{\epsilon}_0 = 13.7$, для 3D WS_2 — $\epsilon_\infty = 14.5$ и $\epsilon_0 = 124.6$; для 2D WSe_2 имеем $\bar{\epsilon}_\infty = 15.1$ и $\bar{\epsilon}_0 = 15.3$, для 3D WSe_2 — $\epsilon_\infty = 15.7$ и $\epsilon_0 = 16.0$. Из приведенных в [32] данных следует, во-первых, что по порядку величины наши оценки диэлектрических характеристик объемных и монослойных соединений A_4B_4 вполне разумны. Во-вторых, по данным [32] величины высокочастотных и статических диэлектрических постоянных мало различаются как в случае 2D, так и в случае 3D. Тот же результат получен и нами (см. табл. 2 и 5). В-третьих, по данным [32], имеем $\epsilon_\infty > \bar{\epsilon}_\infty$ и $\epsilon_0 > \bar{\epsilon}_0$, в то время как нашим оценкам соответствует обратное неравенство. В связи с этим, следует отметить, что использованные нами способы определения решеточных вкладов в случаях 3D [20] и 2D [29] несколько отличались. Так как, однако, $\chi_1^{ion} \ll \chi_1^{el}$ и $\bar{\chi}_1^{ion} \ll \bar{\chi}_1^{el}$, то в отсутствие экспериментальной информации унифицировать расчетные схемы, на наш взгляд, преждевременно.

Обратимся теперь к фотоупругим постоянным графеноподобных соединений, выражения для которых, впервые полученные в [33], имеют вид:

$$\bar{p}_{11} = -\frac{1}{1 + \bar{\sigma}} \frac{\bar{\epsilon}_\infty - 1}{2\bar{\epsilon}_\infty^2}, \quad \bar{p}_{12} = \bar{\sigma} \bar{p}_{11}, \quad (10)$$

где $\bar{\sigma}$ — коэффициент Пуассона. Заимствуя значения $\bar{\sigma}$ из работы [4] и подставляя в (10) вычисленные нами значения $\bar{\epsilon}_\infty$, получим результаты, представленные в табл. 5. Для средних значений \bar{p}_{ij} карбидов имеем $\bar{p}_{11} \sim -0.04$ и $\bar{p}_{12} \sim -0.015$, для соединений II группы $\bar{p}_{11} \sim -0.03$ и $\bar{p}_{12} \sim -0.01$. К сожалению, нам не удалось отыскать в литературе какие-либо экспериментальные данные или результаты численных расчетов фотоупругих постоянных для 2D-структур. Так как $|\bar{p}_{ij}| \sim 10^{-2}$ (тот же результат получен в [33,34]), имеем $|\bar{p}_{ij}| < |p_{ij}|$. Тут следует, однако, указать на различие схем расчета фотоупругих постоянных для 3D [20,21] и 2D [33,34] структур.

Таблица 4. Исходные параметры для графеноподобных соединений A_4B_4 : расстояние между ближайшими соседями \bar{d} , ковалентная \bar{V}_2 и полярная \bar{V}_3 энергии, силовая константа центрального взаимодействия \bar{k}_0 , ковалентность $\bar{\alpha}_c$ связи A–B. Верхний ряд значений — расчет по таблицам Манна [11], нижний ряд — расчет по таблицам Хермана–Скиллмана [9]

Параметр	SiC	GeC	SnC	SiGe	SiSn	GeSn
\bar{d} , Å	1.77	1.86	2.05	2.31	2.52	2.57
\bar{V}_2 , eV	7.93	7.18	5.91	4.66	3.91	3.76
\bar{V}_3 , eV	1.93 1.48	1.95 1.39	2.24 1.85	0.025 0.07	0.57 0.365	0.55 0.45
$\bar{\alpha}_c$	0.97 0.99	0.97 0.99	0.93 0.95	1.0 1.0	0.99 1.0	0.99 0.99
\bar{k}_0 , eV/Å ²	8.66 9.62	7.10 7.89	3.92 4.30	3.49 3.49	2.36 3.46	2.19 2.19

Таблица 5. Значения электронных $\bar{\chi}_1^{el}$ и решеточных $\bar{\chi}_1^{ion}$ вкладов в линейные восприимчивости χ_1 , высокочастотных ϵ_∞ и статических ϵ_0 диэлектрических проницаемостей, коэффициентов Пуассона [4] и фотоупругих постоянных \bar{p}_{ij} для графеноподобных соединений A_4B_4 . Верхний ряд значений — расчет по таблицам Манна [11], нижний ряд — расчет по таблицам Хермана–Скиллмана [9]

Параметр	SiC	GeC	SnC	SiGe	SiSn	GeSn
$\bar{\chi}_1^{el}$	0.54 0.57	0.57 0.60	0.55 0.59	0.77 0.77	0.82 0.84	0.83 0.83
$\bar{\epsilon}_\infty$	7.78 8.16	8.16 8.54	7.94 8.39	10.7 10.7	11.3 11.6	11.5 11.5
$\bar{\chi}_1^{ion}$	0.06 0.02	0.06 0.02	0.18 0.12	0 0	0.03 0	0.03 0.03
$\bar{\epsilon}_0$	8.52 8.39	8.94 8.78	10.2 9.93	10.7 10.7	11.6 11.6	11.8 11.8
$\bar{\sigma}$	0.29	0.33	0.41	0.32	0.37	0.38
$-\bar{p}_{11} \cdot 10^2$	4.34 4.17	4.04 3.89	3.90 3.72	3.21 3.21	2.94 2.88	2.88 2.88
$-\bar{p}_{12} \cdot 10^2$	1.26 1.21	1.33 1.28	1.60 1.53	1.03 1.03	1.10 1.06	1.09 1.09

6. Итак, в настоящей работе мы установили, что все соединения A_4B_4 (как 3D, так и 2D) можно разбить на группу карбидов I и группу II, куда входят SiGe, SiSn и GeSn. Карбиды являются гетерополярными соединениями, так как обладают заметной полярностью связей, соединения группы II практически гомополярны.

Здесь и в работе [8], где рассматривалась упругость карбидов IV группы, мы не выявили каких-либо качественных различий в свойствах 3D- и 2D-соединений. Порядку данных (см., например, [4,35,36]) характер запре-

щенной зоны (прямая, непрямая) для 3D- и 2D-структур одного и того же соединения может различаться. Это обстоятельство, наряду с диэлектрическими и оптическими свойствами 2D-соединений, представляет несомненный интерес для оптоэлектроники (см., например, обзоры [37–39]). Отметим также применение 2D-GeC в литиевых батареях [40,41] и 3D-карбидов для создания сверхрешеток GeC/SiC, SnC/SiC, SnC/GeC [42] и GeC/GaN [43].

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] R. Pandey, M.C. Darrigan, M. Causá. *J. Appl. Phys.* **88**, 6462 (2000).
- [2] A. Mahmood, L.E. Sansores. *J. Mater. Res.* **20**, 1101 (2005).
- [3] A. Hao, X. Yang, X. Wang, Y. Zhu, X. Liu, R. Liu. *J. Appl. Phys.* **108**, 063531 (2010).
- [4] H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R.T. Senger, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **80**, 155453 (2009).
- [5] T.-Y. Lü, X.-X. Liao, H.-Q. Wang, J.-C. Zheng. *J. Mater. Chem.* **22**, 10062 (2012).
- [6] Z. Xu, Y. Li, C. Li, Z. Liu. *Appl. Surf. Sci.* **367**, 19 (2016).
- [7] R. Muthaiah, J. Garg. arXiv: 2107.04596.
- [8] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **64**, 619 (2022).
- [9] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел*. Мир, М. (1983). Т. 1. 382 с.
- [10] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **27**, 3592 (1983).
- [11] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **31**, 2121 (1985).
- [12] А.А. Лебедев, П.А. Иванов, М.Е. Левинштейн, Е.Н. Мохов, С.С. Нагалько, А.Н. Анисимов, П.Г. Баранов. *УФН* **189**, 803 (2019).
- [13] S. Mukherjee, N. Kodali, D. Isheim, S. Wirths, J.M. Hartmann, D. Buca, D.N. Seidman, O. Moutanabbir. *Phys. Rev. B* **95**, 161402 (2017).
- [14] W. Dou, B. Alharthi, P.C. Grant, J.M. Grant, A. Mosleh, H. Tran, W. Du, M. Mortazavi, B. Li, H. Naseem, S.-Q. Yu. *Opt. Mater. Express* **8**, 3220 (2018).
- [15] M. Manikandan, A. Amudhavalli, R. Rajeswarapalanichamy, K. Iyakutti. *Philos. Mag.* **99**, 7, 905 (2019). DOI: 10.1080/14786435.2018.1563310.
- [16] Q.M. Thai, N. Pauc, J. Aubin, M. Bertrand, J. Chrétien, A. Chelnokov, J.M. Hartmann, V. Reboud, V. Calvo. *Appl. Phys. Lett.* **113**, 051104 (2018).
- [17] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. *ФТТ* **64**, 70 (2022).
- [18] Дж. Най. *Физические свойства кристаллов*. Мир, М. (1967). 386 с.
- [19] Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. *Основы кристаллофизики*. Наука, М. (1975). 680 с.
- [20] С.Ю. Давыдов, Е.И. Леонов. *ФТТ* **30**, 1326 (1988).
- [21] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТТ* **37**, 3044 (1995).
- [22] *Физические величины*. Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991). 1232 с.
- [23] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников*. Справочник. Наук. думка, Киев (1987). 608 с.
- [24] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТП* **31**, 823 (1997).
- [25] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТП* **32**, 1057 (1998).
- [26] С.П. Никаноров, Б.К. Кардашов. *Упругость и дислокационная неупругость кристаллов*. Наука, М. (1985). 250 с.
- [27] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела*. Наука, М. (1978).
- [28] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **54**, 1177 (2020).
- [29] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **47**, 1065 (2013).
- [30] E.J.G. Santos, E. Kaxiras. *Nano Lett.* **13**, 898 (2013).
- [31] R. Bessler, U. Duerig, E. Koren. *Nanoscale Adv.* **1**, 1702 (2019).
- [32] A. Laturia, M.L. Van de Put, W.G. Vandenberghe. *npj 2D Mater. Appl.* **2**, 6 (2018). DOI: 10.1038/s41699-018-0050-x.
- [33] Р.А. Браже, А.И. Кочаев, Р.М. Мефтахутдинов. *ФТТ* **59**, 334 (2017).
- [34] С.Ю. Давыдов. *Письма в ЖТФ* **43**, 5, 53 (2017).
- [35] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **58**, 779 (2016).
- [36] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **54**, 446 (2020).
- [37] Z. Li, B. Xu, D. Liang, A. Pan. *Research (Wash. D.C.)* **2020**, 54564258 (2020). DOI: 10.34133/2020/5464258.
- [38] S. Yan, X. Zhu, J. Dong, Y. Ding, S. Xiao. *Nanophotonics* **9**, 1877 (2020).
- [39] T. Tan, X. Jiang, C. Wang, B. Yao, H. Zhang. *Adv. Sci.* **7**, 11, 2000058 (2020). DOI: 10.1002/advs.202000058.
- [40] Y. Ji, H. Dong, T. Hou, Y. Li. *J. Mater. Chem. A*, **6**, 2212 (2018). DOI: 10.1039/C7TA10118J.
- [41] N. Khossossi, A. Banerjee, I. Essaoudi, A. Ainane, P. Jena, R. Ahuja. *J. Power Sources* **485**, 229318 (2021).
- [42] Ю.М. Басалаев, Е.Н. Малышева. *ФТП* **51**, 647 (2017).
- [43] P. Lou, J.Y. Lee. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 14289 (2020).

Редактор Е.Ю. Флегонтова