

BC<sub>5</sub> 力学性质的第一性原理计算\*李德华<sup>1)†</sup> 苏文晋<sup>1)</sup> 朱晓玲<sup>2)</sup>

1) (四川师范大学物理与电子工程学院, 成都 610066)

2) (四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2011年3月31日收到; 2011年5月6日收到修改稿)

采用平面波赝势密度泛函理论方法对 0—60 GPa 静水压下 BC<sub>5</sub> 六角晶系  $P3m1$  和四方晶系  $I\bar{4}m2$  结构的平衡态晶格常数、弹性常数、各向异性以及泊松比与 Cauchy 扰动进行了研究. 研究表明, BC<sub>5</sub> 的两种结构在高压下是稳定的, 且不可压缩性随着压强的增加而增大. 另外, 对其电子结构也进行了计算, 计算结果表明, BC<sub>5</sub> 存在一个较宽的带隙, 两种原子间有较强的共价杂化, 材料的性质主要由 B 的  $2p^1$  和 C 的  $2p^2$  态电子共同决定. 压强对材料带隙和费米能级附近的态密度几乎没有影响, 只引起微小的漂移, 可推断其很好的高压稳定性.

**关键词:** BC<sub>5</sub>, 第一性原理, 力学性质

**PACS:** 31.15.es, 71.15.Mb

## 1 引言

金刚石是世界上最硬的物质 ( $B = 442 \text{ GPa}$ ,  $G = 535 \text{ GPa}$ )<sup>[1-3]</sup>, 作为抛光、切割工具以及涂层材料, 其性能是无与伦比的<sup>[4]</sup>, 但缺点是易和黑色金属反应<sup>[5]</sup>, 且在高温 ( $> 700 \text{ }^\circ\text{C}$ ) 条件下易石墨化. 超硬材料的优越性能体现在工业中的重要应用, 引起人们对超硬材料合成和理论研究的广泛兴趣<sup>[6]</sup>, 如  $c\text{-BN}$ <sup>[7,8]</sup>,  $\text{ReB}_2$ <sup>[3,9]</sup>,  $\text{BC}_2\text{N}$ <sup>[10]</sup> 等. 迄今为止, 工业中应用的超硬材料为金刚石、 $c\text{-BN}$  和类金刚石.  $c\text{-BN}$  ( $H_V = 62 \text{ GPa}$ ) 是目前认为硬度仅次于金刚石的材料<sup>[11]</sup>, 但 Solozhenko 等人<sup>[12]</sup> 在 2009 年报道了合成类金刚石结构的 BC<sub>5</sub> ( $H_V = 71 \text{ GPa}$ ) 的硬度大于  $c\text{-BN}$ , 且具有与金刚石相似的 XRD 图及很高的热稳定性, 是潜在的超硬材料, 但其结构的确定仍然存在一定的争议. 最近, 文献 [13] 提到类金刚石结构 BC<sub>5</sub> 的稳定结构可能为  $P3m1$ , Yao 等<sup>[14]</sup> 运用第一性原理优化得到 4 种可能的空间结构, 分别为  $I\bar{4}m2$ ,  $Imm2$ ,  $P3m1$  和  $P-1$ . 但关于 BC<sub>5</sub> 的  $P3m1$  和  $I\bar{4}m2$  结构的研究较少. 因此, 本文用第一性原理对 0—60 GPa 静水压下 BC<sub>5</sub> 的  $P3m1$  和  $I\bar{4}m2$  结构的力学性质和电子结构进行了研究.

## 2 计算方法

本文利用基于平面波赝势密度泛函理论 MS 软件中的 CASTEP 程序包<sup>[15]</sup> 进行计算. 计算采用 Vanderbilt 超软赝势<sup>[16]</sup>, 交换关联能用广义梯度近似 (GGA)<sup>[17]</sup> 中的 PBE 和局域密度近似 (LDA)<sup>[18,19]</sup> 中的 CA-PZ 形式. 因为两种近似方法存在各自的优缺点, GGA 在计算中常常高估晶格常数, 却低估弹性常数; 而 LDA 在计算中常常低估晶格常数, 却高估弹性常数. 因此我们用 GGA 和 LDA 两种近似计算结果的平均值. 选取同样的计算精度用自洽迭代法在最小傅里叶变换 (fast Fourier-transform, FFT) 网格上对晶体模型进行结构优化, 使其达到稳定的几何结构. 在结构优化的过程中, 自洽场收敛精度为  $5.0 \times 10^{-6} \text{ eV/\AA}$ , 每个原子上的应力  $\leq 0.001 \text{ eV/\AA}$ , 应力偏差  $\leq 0.02 \text{ GPa}$ , 最大原子位移为  $5 \times 10^{-2} \text{ \AA}$ , 所有计算均在倒格矢空间进行, 截断能和  $k$  点的设置分别为  $400 \text{ eV}$ ,  $14 \times 14 \times 6$  ( $P3m1$ ) 和  $320 \text{ eV}$ ,  $8 \times 8 \times 8$  ( $I\bar{4}m2$ ). 计算过程中 B 的  $2s^2 2p^1$  和 C 的  $2s^2 2p^2$  视为价电子.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10974139, 41171175) 资助的课题.

† E-mail: huadel@163.com

### 3 计算结果和讨论

#### 3.1 平衡结构

BC<sub>5</sub> 的  $I\bar{4}m2$  结构属于四方晶系, 布拉伐格子为体心立方, 其中 B 原子占据 Wychoff 网格点 2d, C 原子分别占据 4e, 2b 和 4f 位置. 空间群  $P3m1$  属于六角晶系, 一个 B 原子和 5 个 C 原子分别占据  $1a(0, 0, 0.007)$ ,  $1a(0, 0, 0.2592)$ ,  $1b(1/3, -1/3, 0.3386)$ ,  $1b(1/3, -1/3, 0.5816)$ ,  $1c(2/3, -2/3, 0.6646)$ ,  $1c(2/3, -2/3, 0.8999)$  格点, 结构如图 1 所示.

经过几何优化, 计算得到的晶格常数、弹性常数和体模量列于表 1. 从表 1 可以看出, 本文计算所得的体积与其他的理论值和实验值符合得很好, 与实验值相比仅小约 2.17%. 而晶格常数  $a$  和体模量  $B$  与其他的理论值符合得很好, 但比实验值分别小约 30.34% 和 15.82%. 这与到目前为止对于 BC<sub>5</sub>

的结构尚未确定有关. 本文所计算的弹性常数和各体模量都与其他理论值符合得很好. 从 LDA 和 GGA 计算所得的数据中也可以看出, GGA 在计算中常常高估晶格常数, 低估弹性常数; 而 LDA 却常常低估晶格常数, 高估弹性常数.

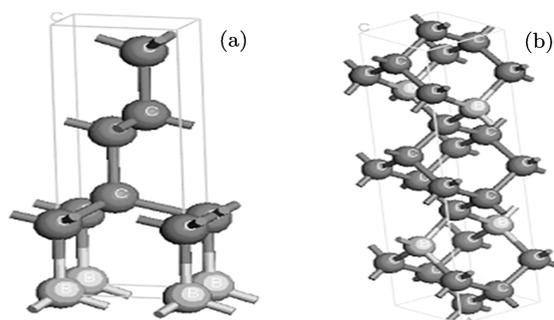


图 1 BC<sub>5</sub> 的结构图 (a)  $P3m1$  结构; (b)  $I\bar{4}m2$  结构

表 1 计算得到的零温零压下晶格常数  $a(\text{\AA})$ ,  $c(\text{\AA})$ , 平衡体积  $V(\text{\AA}^3/\text{atom})$ , 弹性常数  $C_{ij}(\text{GPa})$ 、弹性模量  $B(\text{GPa})$ ,  $G(\text{GPa})$ ,  $E(\text{GPa})$  和泊松比  $\nu$  以及文献值比较

	$P3m1$						$I\bar{4}m2$					
	本文值			参考值			本文值			参考值		
	GGA	LDA	平均值	文献 [13]	文献 [14]	Exp <sup>[11]</sup>	GGA <sup>[20]</sup>	LDA <sup>[20]</sup>	GGA	LDA	文献 [14]	文献 [21]
$a$	2.547	2.516	2.532	2.55	2.553	3.635	2.552	2.522	2.521	2.49	2.525	2.491
$c$	6.385	6.313	6.349	6.375	6.392		6.392	6.324	11.304	11.189	11.323	11.232
$V$	5.978	5.77	5.874	5.794		6.004	6.006	5.805	5.987	5.781		
$C_{11}$	792	868	830				865	931	852	913	775	
$C_{33}$	1001	1079	1040				1086	1164	841	906	830	
$C_{44}$	362	379	371				382	401	482	513	479	
$C_{66}$									307	313	304	
$C_{12}$	220	216	218				177	194	92	86	175	
$C_{13}$	85	92	89			64	69	152	175	169		
$B$	374	401	388			335	379	407	371	400		385.6
$G$	343	374	359				386	410	391	413		
$E$	788	856					865	922	868	921		
$\nu$	0.149	0.144					0.121	0.125	0.11	0.116		

#### 3.2 力学性质

在图 2 中, 我们给出相对晶格常数  $a/a_0$ ,  $c/c_0$  和相对体积  $V/V_0$  ( $a_0$ ,  $c_0$  和  $V_0$  是零压下的晶格常数和体积) 与压强  $p$  的关系. 从 GGA(LDA) 计算所得可以看出, 0—60 GPa 静水压下两种结构在  $c$  轴方向的不可压缩性略高于  $a$  轴, 并且这里计算所得的两组数据没有明显不同.

众所周知, 体模量和剪切模量是表明材料不可压缩性的两个物理量, 但剪切模量能更好的表征材料的硬度<sup>[22]</sup>. 杨氏模量由应力 - 应变关系定义而

来, 一般也用于测量固体材料的硬度. 剪切模量和杨氏模量越高, 材料的硬度越大<sup>[23]</sup>.

由表 1 可知, BC<sub>5</sub> 的六角晶系  $P3m1$  结构剪切模量分别为  $G=343\text{GPa}$  (GGA) 和  $G=374\text{GPa}$  (LDA) 分别是金刚石 ( $G=535\text{GPa}$ )<sup>[1]</sup> 的 64.1% 和 69.9%, 是  $c\text{-BN}$  ( $G=409\text{GPa}$ )<sup>[22]</sup> 的 83.9% 和 91.4%; 四方晶系  $I\bar{4}m2$  结构杨氏模量分别为  $E=868\text{GPa}$  (GGA) 和  $E=921\text{GPa}$  (LDA), 剪切模量分别为  $G=391\text{GPa}$  (GGA) 和  $G=413\text{GPa}$  (LDA), 分别是金刚石 ( $G=535\text{GPa}$ )<sup>[1]</sup> 的 73.1% 和 77.2%, 是  $c\text{-BN}$  ( $G=409\text{GPa}$ )<sup>[22]</sup> 的 95.6% 和 101%, 且远大

于 2007 年合成的超硬材料  $\text{ReB}_2$  的剪切模量  $G = 283 \text{ GPa}$ <sup>[24]</sup>. 由此可知,  $\text{BC}_5$  是可与目前工业中所应用的超硬材料相比拟的低压缩性材料, 且在高压下四方晶系结构的不可压缩性大于六角晶系结构. 为更直观描述  $\text{BC}_5$  的性质, 图 3 给出 GGA 计算所得各弹性模量随压强的变化关系. 从图 3 可以看出, 体模量  $B$ 、剪切模量  $G$  和杨氏模量  $E$  随着压强  $p$  的增加而增大, 说明  $\text{BC}_5$  的不可压缩性和硬度随着压强的增加而增大.

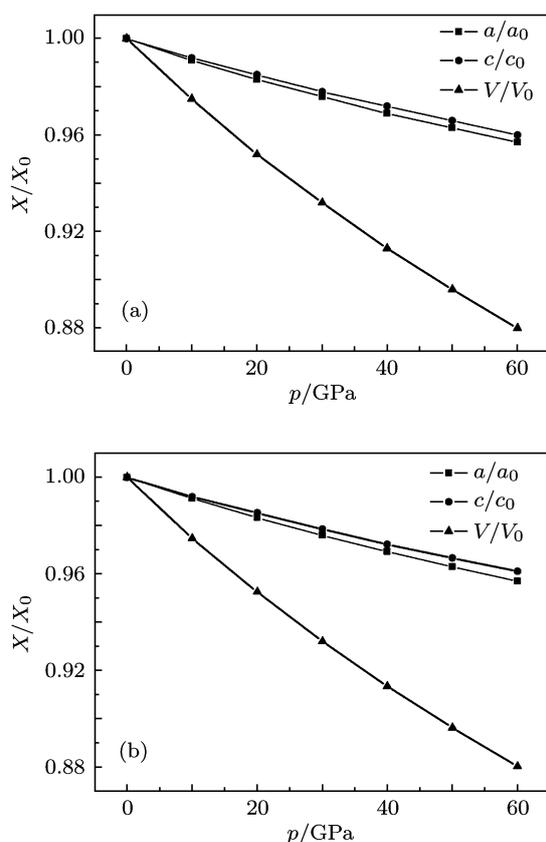


图 2  $\text{BC}_5$  的两种结构相对晶轴比及体积比随压强的变化关系 (a)  $P3m1$  结构; (b)  $I4m2$  结构

实践证明, 金属材料的各种硬度值之间, 硬度值与强度值之间具有近似的相应关系. 硬度值是由起始塑性变形抗力和继续塑性变形抗力决定的, 材料的强度越高, 塑性变形抗力越高, 硬度值也就越高. 同时, 硬度和其他力学性质一样与材料的宏观和微观性质有关, 由材料的刚性、配位数、共价键、原子间距等决定. 材料硬度大小与试验方法有关, 因此相互之间不能直接互换, 但可以通过试验来对比. 在理论上, 硬度与体模量直接相关, 对类金刚石结构硬度与体模量间的回归拟合经验关系为<sup>[25]</sup>(单位: kb)

$$H = 0.189B - 68.2.$$

用上式计算出  $\text{BC}_5$  的  $P3m1$  结构硬度值为  $73.2 \text{ GPa}$ ,  $I4m2$  结构硬度值为  $73.5 \text{ GPa}$ (此处所用数据为用 GGA 和 LDA 计算所得  $B$  的平均值), 均与文献 [11] 中的实验值相符, 且大于  $c\text{-BN}$  的硬度值, 而由上式计算出的金刚石硬度值为  $83.5 \text{ GPa}$ .

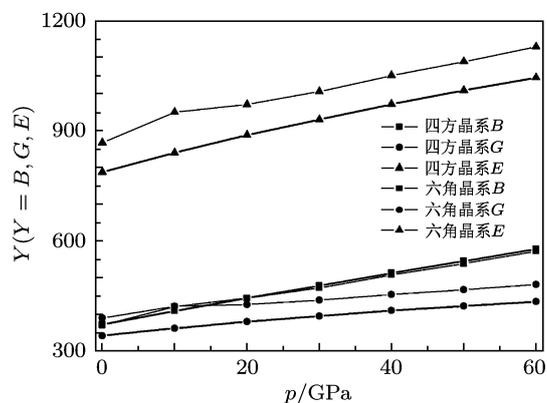


图 3  $\text{BC}_5$  的两种结构弹性模量  $B, G, E$  随压强  $p$  的变化关系

六角晶系有 5 个独立的弹性常数, 四方晶系有 6 个独立的弹性常数, 需要满足的稳定性标准分别为<sup>[26]</sup>

$$\begin{aligned} C_{11} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, \\ C_{66} &= (C_{11} - C_{12})/2 > 0, \\ (C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2 &> 0, \\ C_{11} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, C_{66} &> 0, \\ C_{11} - C_{12} > 0, C_{11} + C_{33} - 2C_{13} &> 0, \\ [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] &> 0. \end{aligned}$$

我们计算了 0—60 GPa 静水压下  $\text{BC}_5$  的弹性常数、弹性模量和泊松比, 如表 2 和表 3 所示. 表中数据为采用 GGA 计算所得. 由表 2 和表 3 可知, 在 0—60 GPa 弹性常数均满足上述稳定性条件, 由此预测  $\text{BC}_5$  在高压下也是力学稳定的.

从表 2 和表 3 还可以看出各弹性模量随压强增加而增大. 图 4 给出了六角晶系各弹性常数随压强的变化关系.  $C_{11}$  和  $C_{33}$  随压强增加呈现线性增加, 而另外 4 个弹性常数随压强的变化较小, 尤其  $C_{44}$  和  $C_{66}$  仅略增加. 在 0—60 GPa  $C_{33}$  始终大于  $C_{11}$ , 说明  $\text{BC}_5$  的  $P3m1$  结构在  $z$  方向的不可压缩性要大于  $x$  和  $y$  方向, 这与  $z$  方向的 B—C 共价键有关. 同时, 我们对  $\text{BC}_5$  的  $I4m2$  结构的弹性常数和压强的关系进行了线性拟合, 拟合关系如下:

$$C_{11} = 860.43 + 5.76p, \quad C_{33} = 838.29 + 4.81p,$$

$$C_{44} = 495.11 + 2.10p, \quad C_{66} = 305.04 + 0.59p, \quad C_{12} = 86.75 + 1.38p, \quad C_{13} = 156.89 + 2.76p.$$

表2 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构 0—60 GPa 各压强点弹性常数  $C_{ij}$ (GPa), 弹性模量  $B$ (GPa),  $G$ (GPa),  $E$ (GPa) 和泊松比  $\nu$

$p/\text{GPa}(\text{GGA})$	$C_{11}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$B$	$G$	$E$	$\nu$
0	868	1079	379	216	92	401	374	856	0.144
10	929	1136	393	238	114	436	391	903	0.155
20	991	1191	405	260	136	471	408	950	0.164
30	1045	1248	413	284	158	504	421	988	0.173
40	1101	1303	423	307	181	538	434	1026	0.182
50	1154	1355	433	329	203	570	448	1065	0.189
60	1209	1405	441	350	226	603	461	1102	0.195

表3 BC<sub>5</sub> 的  $\bar{I}4m2$  结构 0—60 GPa 各压强点弹性常数  $C_{ij}$ (GPa), 弹性模量  $B$ (GPa),  $G$ (GPa),  $E$ (GPa) 和泊松比  $\nu$

$p/\text{GPa}(\text{GGA})$	$C_{11}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$B$	$G$	$E$	$\nu$
0	852	841	482	307	92	152	371	391	868	0.110
10	916	875	532	307	93	192	422	423	951	0.124
20	986	944	537	320	117	213	445	428	972	0.136
30	1038	981	557	322	127	236	473	440	1008	0.145
40	1094	1036	580	329	142	267	508	455	1051	0.155
50	1146	1077	600	331	153	295	539	468	1089	0.163
60	1200	1125	618	343	172	323	573	482	1129	0.172

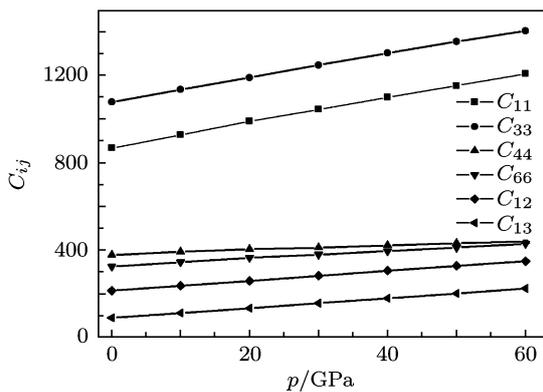


图4 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构弹性常数  $C_{ij}$  和压强  $p$  的关系

由此可知,  $C_{11}$  和  $C_{33}$  比  $C_{44}$ ,  $C_{66}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$  随压强的增加变化更明显. 遗憾的是, 这里没有其他文献值作参考.

六角结构的各向异性参数由以下公式给出 [27]:

$$\begin{aligned} \Delta p &= C_{33}/C_{11}, \\ \Delta S_1 &= (C_{11} + C_{33} - 2C_{13})/4C_{44}, \\ \Delta S_2 &= 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}), \end{aligned}$$

其中  $\Delta p$  为压缩波各向异性,  $\Delta S_1$ ,  $\Delta S_2$  为两个剪切波各向异性, 三者都为 1 说明材料为各向同性 [28]. 图 5 给出了计算所得的 3 个各向异性参数随压强变

化曲线.  $\Delta p$ ,  $\Delta S_1$  和  $\Delta S_2$  在各压强点都偏离 1, 说明 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构呈现各向异性. 若  $\nu$  在 0.25—0.5 范围内说明为中心力 [29], 而从表 2 计算得到的值可知 BC<sub>5</sub> 的  $\nu$  值在 0—60 GPa 虽然有所增加, 但低于 0.25, 所以为非中心力. Cauchy 扰动可以表征固体非中心力的特性, 并由公式  $C_{12} = C_{66} + 2p$ ,  $C_{13} = C_{55} + 2p$ ,  $C_{23} = C_{44} + 2p$  [28] 给出. 在不考虑温度影响和零压下, 六角晶系的 Cauchy 扰动可表示为  $C_{12}/C_{66}$  和  $C_{13}/C_{55}$  [28], 计算值分别为 0.66 和 0.24. 在静水压作用下, Cauchy 扰动关系可表述为 [28]

$$3C_{12} - C_{11} = 4p, \quad C_{13} - C_{44} = 2p.$$

图 6 给出了 Cauchy 扰动随压强的变化关系. 可以看出, 扰动随压强增加而降低,  $3C_{12} - C_{11} = 4p$  随压强增加而大幅度降低,  $C_{13} - C_{44} = 2p$  受压强影响不大.

对于四方晶系,  $C_{55} = C_{44}$ ,  $C_{23} = C_{13}$ , 故 Cauchy 扰动可由下式表述:

$$C_{12} - C_{66} = 2p, \quad C_{13} - C_{44} = 2p.$$

图 7 中 BC<sub>5</sub> 的  $\bar{I}4m2$  结构 Cauchy 扰动随压强增加而单调递减. 其原因是随压强增加原子排列更

加紧密,非中心力有所减弱.

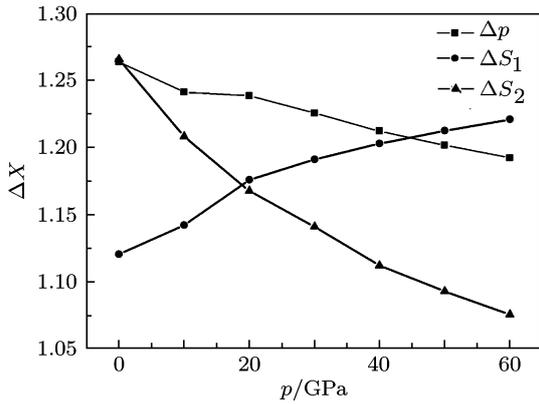


图5 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构弹性各向异性随压强的 *p* 变化关系

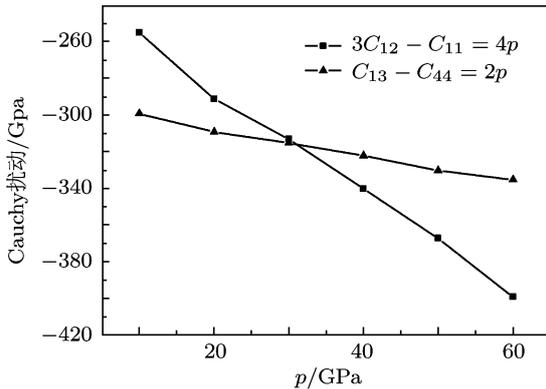


图6 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构 Cauchy 扰动随压强 *p* 的变化关系

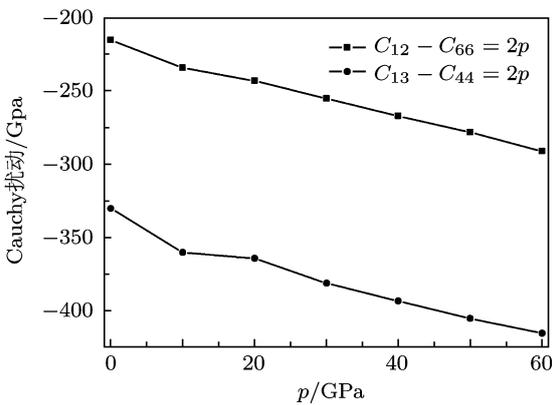


图7 *I4m2* 结构 Cauchy 扰动随压强 *p* 的变化关系

#### 4 电子结构

为更多的了解 BC<sub>5</sub> 的性质, 我们还用 GGA 和 LDA 分别计算了 *P3m1* 和 *I4m2* 两种结构零压下的能带结构和态密度. 两种计算方法所得结果极为相似, 故只给出用 GGA 计算的结果 (图中虚线为费米能级). 图 8 和图 10 分别为 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构

和 *I4m2* 结构沿布里渊区高对称方向的能带结构, 图 9 和图 11 分别为 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构和 *I4m2* 结构的态密度. 从图 8 和图 10 可以看出, 在费米能级处不为零, 对应的图 9 和图 11 态密度图中费米线处总态密度不为零, 说明 BC<sub>5</sub> 呈现金属性. 同时从能带图发现 BC<sub>5</sub> 的 *I4m2* 结构存在一个较宽的带隙 ( $E_g \approx 2.5$  eV), 可望成为适用于高温条件的潜在的超硬材料. 能带结构和带隙在 0—60 GPa 均无明显改变, 进一步证明了材料在高压下的稳定性.

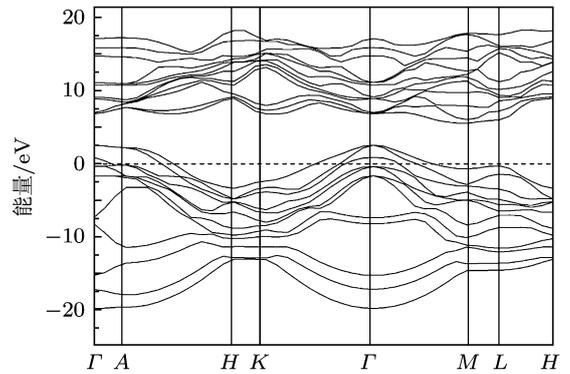


图8 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构能带结构

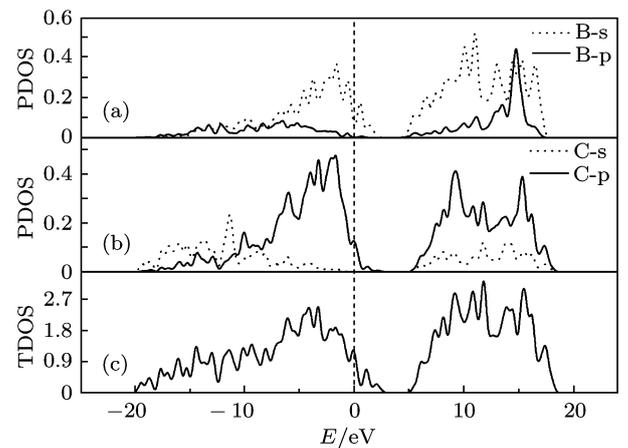


图9 BC<sub>5</sub> 的 *P3m1* 结构态密度

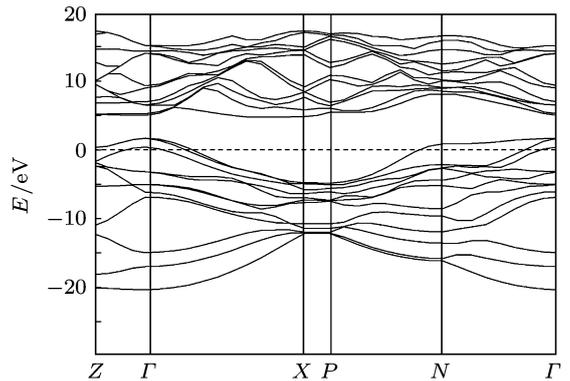
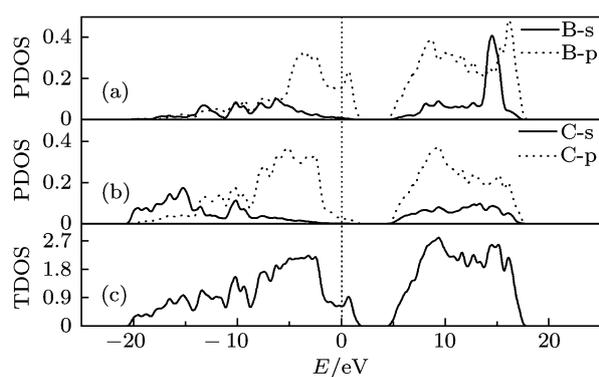
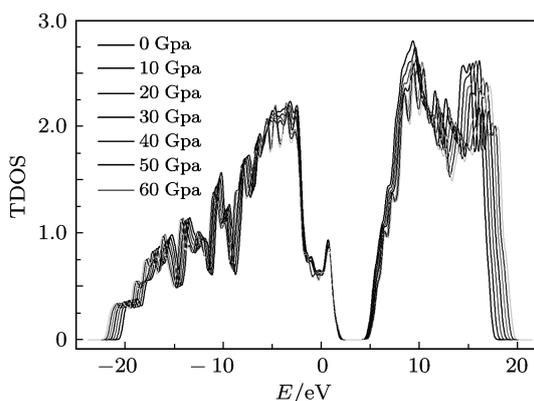


图10 BC<sub>5</sub> 的 *I4m2* 结构能带结构

图 11 BC<sub>5</sub> 的  $I\bar{4}m2$  结构的态密度图 12 BC<sub>5</sub> 的  $I\bar{4}m2$  结构总态密度随压强  $p$  的变化

为了更直观的研究压强对 BC<sub>5</sub> 性质的影响,我们还计算了  $I\bar{4}m2$  结构不同压强点费米能级附近的总态密度,如图 12 所示.由图可知,压强对费米能级附近的态密度和带隙几乎没有影响,只引起态密度的微小漂移.

## 5 结论

本文采用第一性原理计算了 0—60 GPa 静水压下 BC<sub>5</sub> 的  $P3m1$  和  $I\bar{4}m2$  结构的平衡态晶格常数、弹性常数、各向异性以及泊松比与 Cauchy 扰动.计算结果表明,BC<sub>5</sub> 的两种结构在高压下是稳定的,且不可压缩性随压强增加而增大.同时,BC<sub>5</sub> 的  $P3m1$  结构  $C_{11}$  和  $C_{33}$  随压强增加呈线性增加,在 0—60 GPa  $C_{33}$  始终大于  $C_{11}$ ,说明 BC<sub>5</sub> 的  $P3m1$  结构在  $z$  方向的压缩性小于  $x$  和  $y$  方向,这与  $z$  方向的 B—C 共价键有关.通过对其各向异性参数分析可知,压强的增加改变了  $P3m1$  结构的各向异性,使其压缩时各向异性降低,而剪切模量各向异性有所增加.通过对硬度的模拟计算,得到与实验结果相一致的结论.在对平衡结构和硬度的理论研究中无法对两种计算结果的不可压缩性进行比较,只有杨氏模量显示  $I\bar{4}m2$  结构的不可压缩性要高于  $P3m1$  结构.本文还研究了 BC<sub>5</sub> 的泊松比与 Cauchy 扰动随压强的变化,说明原子间相互作用力为非中心力.另外,对其电子结构也进行了计算,计算结果表明,BC<sub>5</sub> 存在一个较宽的带隙,两种原子间有较强的共价杂化,材料性质主要由 B 的  $2p^1$  和 C 的  $2p^2$  电子共同决定.还得到费米能级处态密度主要由 B 的  $2p^1$  提供,故此化合物呈现金属特性.另外,压强对材料带隙和费米能级附近的态密度几乎无影响,只引起微小的漂移,可推断其很好的高压稳定性,并可望成为适用于高温条件的潜在的超硬材料.

- [1] Cohen M L 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7988
- [2] Liu Y L, Kong F J, Yang B W, Jiang G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5413 (in Chinese) [刘以良, 孔凡杰, 杨缤维, 蒋刚 2007 物理学报 **56** 5413]
- [3] Liu Y Y, Bauer-Grosse E, Zhang Q Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6572 (in Chinese) [刘燕燕, E. Bauer-Grosse, 张庆瑜 2007 物理学报 **56** 6572]
- [4] Novikov N V 2005 *J. Mater. Proc. Tech.* **161** 169
- [5] Chung H Y, Weinberger M B, Levine J B 2007 *Science* **316** 436
- [6] Kaner R B, Gilman J J, Tolbert S H 2005 *Science* **308** 1268
- [7] Knittle E, Kaner R B, Jeanloz R, Cohen M L 1995 *Phys. Rev. B* **51** 12149
- [8] Hao Y J, Cheng Y, Wang Y J, Chen X R 2007 *Chin. Phys. Lett.* **16** 217
- [9] Zhu X L, Li D H, Cheng Y L 2008 *Solid State Commun.* **147** 301
- [10] Solozhenko V L, Andrault D, Fiquet G, Mezouar M, Rubie D C 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 1385
- [11] Solozhenko V L, Dubrovinskaja N A, Dubrovinsky L S 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1508
- [12] Solozhenko V L, Kurakevych O O, Andrault D, Godec Y Le, Mezouar M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 015506
- [13] Calandra M, Mauri F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 016401
- [14] Yao Y, Tse J S, Klug D D 2009 *Phys. Rev. B* **80** 094106
- [15] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 2717
- [16] Ceperley D M, Alder B J 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [17] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [18] Ceperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [19] Perdew J P, Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [20] Liang Y C, Zhang W Q, Zhao J Z, Chen L F 2009 *Phys. Rev. B* **80** 113401
- [21] Shao X 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 016101
- [22] Teter D M 1998 *MRS Bull.* **23** 22
- [23] Peng F, Chen D, Yang X D 2009 *Solid State Communications* **149** 2135
- [24] Zhou W, Wu H, Yildirim T 2007 *Phys. Rev. B* **76** 184113
- [25] Sung C M, Sung M 1996 *Mater. Chem. Phys.* **43** 1
- [26] Born M 1940 *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **36** 160
- [27] Neumann G S, Stixrude L 1999 *Phys. Rev. B* **60** 791
- [28] Zha C S, Mao H-k W, Hemley R J 2004 *Phys. Rev. B* **70** 174107
- [29] Ledbetter H M 1973 *J. Phys. Chem. Solids* **34** 721

# First-principles calculations for the mechanical properties of $\text{BC}_5^*$

Li De-Hua<sup>1)†</sup> Su Wen-Jin<sup>1)</sup> Zhu Xiao-Ling<sup>2)</sup>

1) (College of Physics and Electronic Engineering, Sichuan Normal University, Chengdu 610066, China)

2) (College of Physics Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

(Received 31 March 2011; revised manuscript received 6 May 2011)

## Abstract

We employ ab initio plane-wave pseudo potential density functional theory to calculate the equilibrium lattice parameters, elastic constants, anisotropies, Poisson's ratios, and the Cauchy violation under hydrostatic pressures of 0–60 GPa for  $\text{BC}_5$  with hexagonal  $P3m1$  and tetragonal  $\bar{I}4m2$  structures. The results show that two structures are stable under high pressure and the incompressibility increases with pressure. In addition, the electron structures, the total and the partial densities of states are also calculated.  $\text{BC}_5$  is found to be metallic with band gap, unlike other B–C compounds. The material properties of  $\text{BC}_5$  are mainly determined by B  $2p^1$  and C  $2p^2$  electronic states together. All these show that  $\text{BC}_5$  is an unusual super hard material, and it may be a potential candidate for diamond at high temperature. The given density of states indicates the covalent hybridization between B and C atoms in this compound. The pressure slightly influences the density of states and the band gap, indicating stability under high pressure. We also find that pressure has no influence on the density of states near Fermi level and the band gap, except for slight shifts of the bands. It can be further inferred that  $\text{BC}_5$  will have good stability under high pressure.

**Keywords:**  $\text{BC}_5$ , first-principles, mechanical properties

**PACS:** 31.15.es, 71.15.Mb

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974139, 41171175).

† E-mail: huadel@163.com