

IrB和IrB₂力学性质的第一性原理计算*曾小波¹⁾ 朱晓玲²⁾ 李德华^{1)†} 陈中钧³⁾ 艾应伟⁴⁾

1)(四川师范大学物理与电子工程学院, 成都 610066)

2)(成都学院电子信息工程学院, 成都 610106)

3)(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

4)(四川大学生命科学学院, 成都 610064)

(2014年2月25日收到; 2014年4月18日收到修改稿)

采用平面波赝势密度泛函理论对0—100 GPa静水压下P₁-IrB(空间群 $Pnma$)和P₅-IrB₂(空间群 $Pm\bar{m}n$)结构的平衡态晶格常数、弹性常数等性质进行了研究. 研究表明, P₁-IrB不可压缩性随着压强的增加而增强; P₅-IrB₂结构在0—100 GPa范围内弹性常数、体弹模量、剪切模量均呈现出有规律的变化, 当所加压强为50 GPa时, 杨氏模量和在 b 方向的晶格常数发生异常变化. 对零压下P₁-IrB和P₅-IrB₂的电子结构的研究发现, 二者均没有一个明显的带隙, 主要原因为Ir原子和B原子间的共价作用. 从P₁-IrB和P₅-IrB₂的能带结构和态密度图可以发现这两种结构均有金属性.

关键词: P₁-IrB, P₅-IrB₂, 第一性原理, 力学性质

PACS: 31.15.es, 17.15.Mb

DOI: 10.7498/aps.63.153101

1 引言

众所周知, 金刚石是自然界中最硬的材料, 其硬度值约为90 GPa^[1-3], 但金刚石在600 °C时会发生氧化反应以及容易与铁族金属反应^[4,5], 而自身天然储量的有限和性质上稳定性的不足以及现代工业的发展对高硬度、高强度、耐高温和抗腐蚀性的新型超硬材料的迫切需要, 使得众多科研工作者致力于新型超硬材料的探究. 近年来, 比较成功的方式有两大类^[6,7]: 一是将轻元素C, B, N, O等在一定条件下相结合, 形成具有较短键长的共价化合物, 如人工合成的硬度仅次于金刚石的 c -BN^[8-13]和BC₅^[14,15]; 二是将部分过渡金属与轻元素C, N, B等相结合, 形成部分共价化合物, 如ReB₂^[16], OsB₂^[6,7]. 较之金刚石在一定条件下性质的不稳定和 c -BN需要在高温高压下合成且成本较高的缺点, 科研人员发现一些过渡金属硼化物ReB₂, OsB₂, TaB₂, WB₄^[16-20]等, 在相对较低的

成本下就可以合成, 且具有较高的体弹模量和剪切模量值, 这为新型超硬材料的研究提供了崭新的思路 and 方向.

实验上利用电子束装置在真空条件下合成了纯相IrB_{1.35}^[21] (空间群 $C2/m$)和IrB_{1.1}^[22] (空间群 $I41/AMDS$), 但目前实验上还没有合成关于B原子和Ir原子比例是整数比的硼化铱. Zhao等^[23]对空间群为 $P6_3/mmc$ 的IrB和空间群分别为 $P6/mmm$, $P6/m\bar{m}n$ 和 $P6_3/mmc$ 的IrB₂结构做了一定的研究, 得出IrB结构的硬度值为12.36 GPa, 计算的弹性常数本征值均为正值, 说明其结构相是弹性稳定的; 同样, 计算得到 $P6/m\bar{m}n$ 和 $P6_3/mmc$ 两种结构的硬度值分别为14.97 GPa和25.6 GPa, 前者硬度值小于后者, 但其结构相较为稳定. Wang等^[24]在零压下对不同构型的IrB(IrB-NiAs, IrB-anti-NiAs, IrB-NaCl, IrB-WC, IrB-CsCl)用第一性原理做了相应力学性质的运算, 得出NaCl-type, WC-type, anti-NiAs-

* 国家自然科学基金(批准号: 41171175)和四川省高校科研创新团队基金(批准号: 12TD008)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: huadel@163.com

type的IrB结构的稳定性是逐渐增强的. Wang等^[25]则在零压下基于第一性原理用晶体结构预测技术(CALYPSO)^[26]预测了两种硼化铱类物质的新构型,即 P_1 -IrB(空间群 $Pnma$)和 P_5 -IrB₂(空间群 $Pm\bar{m}n$)结构,做了力学性质方面的初步研究,得出两种结构在零压下的力学性质和弹性性能是稳定的,根据其高体弹模量值判定预测的两种结构均为潜在的抗压缩性材料,同时,对态密度图和化学键的分析得知强共价键的作用对结构稳定性有促进作用.目前,理论上关于IrB和IrB₂的研究很少,尤其在加压后这两种结构的力学性质的变化,加压对原子间的相互作用的影响,以及这两类结构可否成为耐高压的新型材料等方面的研究甚少.因此,本文在文献^[23, 25]的基础上利用基于平面波赝势密度泛函理论对 P_1 -IrB和 P_5 -IrB₂在静水压0 GPa下的平衡态晶格常数、弹性常数,以及能带结构和态密度方面的性质进行了研究,并探讨了0—100 GPa这两种结构相关力学性质的变化关系,希望为实验上合成IrB和IrB₂提供参考.

2 计算方法

第一性原理密度泛函理论(DFT)可以预测材料的组分、结构与性能^[27],设计具有特定功能的新材料,因而受到众多研究者的高度关注,在这方面取得了许多的研究成果^[28,29],得到了很大的发展.近年来,理论物理学家和计算物理学家为了克服DFT的缺陷不断努力,提出LDA+DMFT(动力学平均场理论)^[30]等方法,特别是在用第一性原理计算激发态和过渡态金属方面,发展了许多新的方法,如含时密度泛函(TDDFT)方法^[31],LDA+Gutzwiller(LDA+G)方法^[32]等.

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^[33]进行计算.计

算采用Vanderbilt超软赝势^[34],交换关联能用广义梯度近似(GGA)^[35]中的PBE和局域密度近似(LDA)^[36,37]中的CA-PZ形式.充分考虑两种近似方法的优缺点:GGA在计算中高估晶格常数而低估弹性常数;LDA则会低估晶格常数而高估弹性常数^[15].因而我们用LDA和GGA两种方法进行计算.在保证计算精度一致的情况下,用自洽场迭代法在最小傅里叶变换(FFT)网格上对晶体模型进行结构优化,使其空间结构达到稳定.优化过程中,自洽场收敛精度为 5.0×10^{-6} eV/Å,每个原子上的最大应力为0.01 eV/Å,应力偏差不大于0.02 GPa,最大原子位移 5.0×10^{-4} Å,所有计算均在倒格矢空间中进行,布里渊区的特殊点积分采用Monkhorst-Pack方法^[38,39]两种结构的截断能均为500 eV. P_1 -IrB和 P_5 -IrB₂结构的 K 点设置分别为 $6 \times 9 \times 4$ 和 $8 \times 5 \times 6$.计算过程中Ir的 $4f^{14}5d^76s^2$ 和B的 $2s^22p^1$ 视为价电子.

3 计算结果与讨论

3.1 平衡结构

P_1 -IrB结构的空间群为 $Pnma$,属于正交晶系,结构中Ir和B的原子位置分别为(0.3455, 0.2500, 0.6336)和(0.3731, 0.2500, 0.9504). P_5 -IrB₂结构的空间群为 $Pm\bar{m}n$,亦属于正交晶系,原子分别占据(0, 0, 0.6639)和(0.5, 0.3007, 0.8503)位置.二者的结构如图1所示.

经过几何优化,计算得到的晶格常数、弹性模量、剪切模量列于表1.从表1可以看出,计算所得晶格常数、体积与文献^[23, 25]值符合较好.GGA近似下本文计算的弹性模量和剪切模量值与文献^[23, 25]值符合较好.比较遗憾的是目前还未能能在实验上确定 P_1 -IrB和 P_5 -IrB₂的结构,因而没有可靠的实验值供参考.

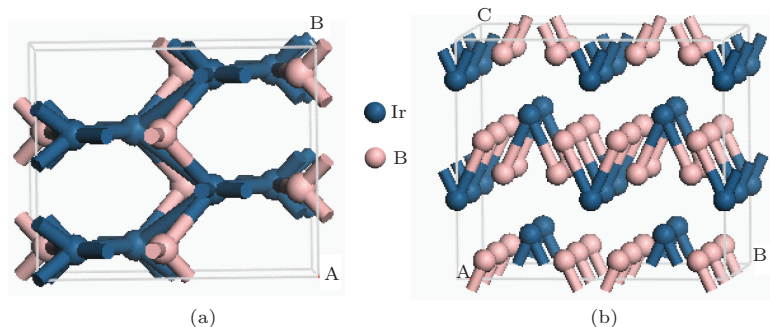


图1 P_1 -IrB和 P_5 -IrB₂的结构图 (a) P_1 -IrB结构($1 \times 2 \times 1$ supercell); (b) P_5 -IrB₂结构($2 \times 2 \times 2$ supercell)

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

	P ₁ -IrB(<i>Pnma</i>)			P ₅ -IrB ₂ (<i>Pmmn</i>)				
	本文值		参考值	本文值		参考值		
	GGA	LDA	文献 [25]	GGA	LDA	文献 [25]	GGA [23]	LDA [23]
a	4.411	4.336	4.428	3.177	3.138	3.152	3.153	3.113
b	2.856	2.799	2.870	4.540	4.462	4.548	4.547	4.487
c	7.092	7.000	7.021	4.024	3.961	4.042	4.042	3.993
V	22.333	21.234	22.310	29.015	27.726	28.970		
C_{11}	552	643	514	372	408	353	345	377
C_{22}	412	504	368	420	451	416	414	450
C_{33}	481	548	438	690	774	676	669	745
C_{44}	38	43	55	50	56	69	62	88
C_{55}	247	277	227	68	74	68	67	73
C_{66}	115	132	106	146	154	140	137	144
C_{12}	127	141	108	249	276	239	241	273
C_{13}	344	383	333	164	183	138	139	159
C_{23}	170	186	183	173	185	171	170	188
B	286	371	274	286	314	277	274	307
G	134	157	124	111	122	108	104	118
E	358	427	323	280	305	288	277	314

3.2 力学性质

体弹模量和剪切模量是表征材料不可压缩性的两个重要参数, 剪切模量更能表征材料硬度^[15], 杨氏模量一般用于测量固体材料的硬度. 总之, 剪切模量和杨氏模量值越高, 材料的硬度越大^[40]. 从表 1 可知: 计算所得 P₁-IrB 的剪切模量为 134 GPa (GGA) 和 157 GPa (LDA), P₅-IrB₂ 的剪切模量为

111 GPa (GGA) 和 122 GPa (LDA). 我们给出了两种结构的弹性模量 (B, G, E) 随压强 p 的变化关系, 如图 2 所示. 从图 2 可以看出: 随着压强的增加, 两种结构的弹性模量均呈现不同程度的增大趋势, 但 P₅-IrB₂ 结构在 50 GPa 时杨氏模量值突然增大, 而杨氏模量是指在弹性限度内物质材料抗压或抗拉的物理量, 因此推测在 50 GPa 时, 加压使得原子间的相互作用及原子间的结合能受到影响.

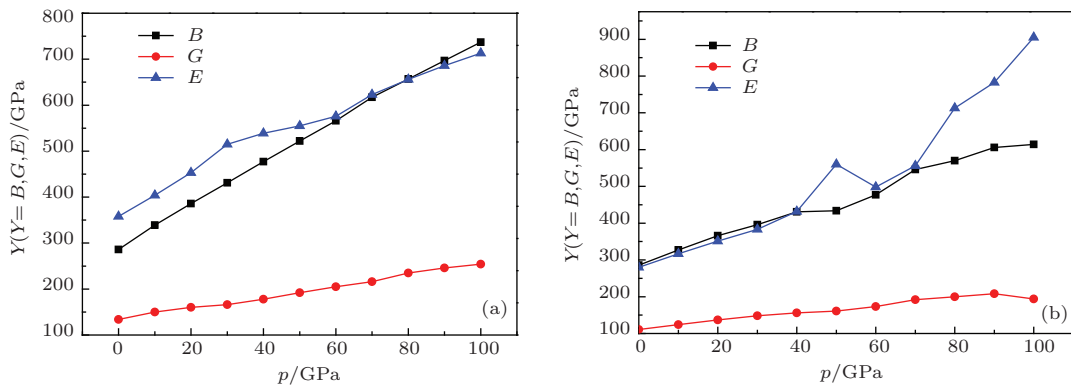


图 2 P₁-IrB 和 P₅-IrB₂ 弹性模量 B, G, E 随压强 p 的变化关系 (a) P₁-IrB 结构; (b) P₅-IrB₂ 结构

如图3所示为在GGA近似下, 0—100 GPa静水压下两种结构在 a, b, c 三个方向上各自的相对晶格常数 $a/a_0, b/b_0, c/c_0$ 随压强 p 的变化关系. 从图3可以看出: P_1 -IrB结构在 b 方向上的不可压缩性明显较 a, c 两个方向上低; 而 P_5 -IrB₂ 结构在 a 方向上压缩较快, c 方向上有较稳定的不可压缩性, 在 b 方向上则随着压强增大到 50 GPa 时不可压缩性反而增强, 从图1中的结构图可知: 原子在空间的分布并不是等间距的, 而且原子间的相互作用在各方向上也不相等, 因而, 加压对各方向晶格常数的变化有不同的变化趋势, 对于 P_5 -IrB₂ 在 50 GPa 时 b 方向上的晶格常数发生的异常变化, 可能由加压后使得此结构中该方向上原子间共价作用受到影响所致.

研究表明, 金属材料的各种硬度值之间, 硬度值与强度值之间有着近似的相应关系^[13]. 硬度值是由起始塑性变形抗力决定的, 材料的强度越大, 塑性变形抗力越高, 硬度值也就越高, 材料的硬度值与其他力学性质一样, 与自身的宏观性质和微观性质均有关系, 由刚性、配位数、共价键、原子分

布等决定. 理论上, 硬度值与体弹模量值直接相关. 为表征出这一类关系, 本文采用GGA近似计算0—100 GPa下的弹性常数、弹性模量, 如表2和表3所示, 同时作出了两种结构的 C_{ij} 随压强 p 的变化关系, 如图4和图5所示.

根据正交晶系晶体稳定性条件^[41]:

$$\begin{aligned}
 &C_{11} > 0, \quad C_{11}C_{12} - C_{12}^2 > 0, \\
 &C_{33}[C_{11}C_{12} - C_{12}^2 + C_{13}(C_{12}C_{13} - C_{23})] > 0, \\
 &C_{44}C_{33}[C_{11}C_{12} - C_{12}^2 + C_{13}(C_{12}C_{13} - C_{23})] > 0, \\
 &C_{55}C_{44}C_{33}[C_{11}C_{12} - C_{12}^2 \\
 &\quad + C_{13}(C_{12}C_{13} - C_{23})] > 0, \\
 &C_{66}C_{55}C_{44}C_{33}[C_{11}C_{12} - C_{12}^2 \\
 &\quad + C_{13}(C_{12}C_{13} - C_{23})] > 0,
 \end{aligned}$$

代入本文计算的 P_5 -IrB₂ 各压强下的 C_{ij} 值得出在 50 GPa 内均满足稳定性条件, 但压强达到 50 GPa 及以上时, 其弹性常数不再满足此稳定性条件, 说明高压下该晶体结构发生了改变.

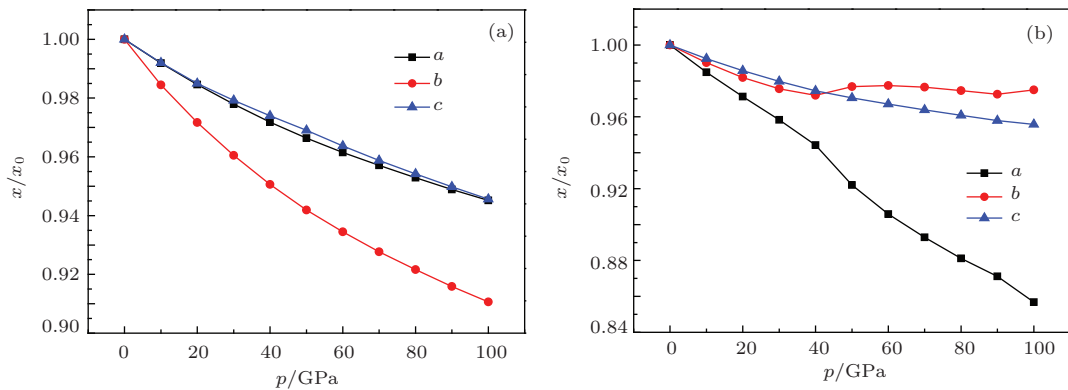


图3 相对晶格常数 $a/a_0, b/b_0, c/c_0$ 随压强 p 的变化关系 (a) P_1 -IrB 结构; (b) P_5 -IrB₂ 结构

表2 P_1 -IrB 结构 GGA 近似条件下 0—100 GPa 各压强的弹性常数 C_{ij} (GPa), 弹性模量 (B, G, E) (GPa)

p/GPa	C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	C_{12}	C_{13}	C_{23}	B	G	E
0	552	412	481	38	247	115	127	344	170	286	134	358
10	638	517	549	31	273	124	151	393	198	339	150	404
20	717	588	600	21	297	130	168	437	242	386	160	453
30	794	640	635	8	319	136	189	479	301	431	166	515
40	869	714	697	3	341	141	214	521	333	477	178	539
50	942	816	775	-11	360	146	238	560	339	522	192	555
60	1010	904	841	-20	380	151	260	599	357	566	205	576
70	1080	989	901	-35	399	157	278	639	375	617	216	623
80	1137	1059	957	8	413	161	303	676	340	657	235	656
90	1204	1133	1010	2	432	166	324	714	424	697	246	686
100	1269	1200	1055	-6	449	171	346	753	455	737	254	713

表3 P₅-IrB₂ 结构在 GGA 近似下 0—100 GPa 各压强点弹性常数 C_{ij} (GPa), 弹性模量 (B, G, E) (GPa)

p/GPa	C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	C_{12}	C_{13}	C_{23}	B	G	E
0	372	420	690	50	68	146	249	164	173	286	111	280
10	413	469	770	74	74	155	294	193	204	327	124	317
20	448	506	853	101	85	164	345	218	235	366	137	351
30	464	551	913	143	90	167	381	244	267	396	148	383
40	476	592	989	169	99	170	444	278	299	431	156	432
50	481	620	1050	191	108	176	509	320	330	434	161	560
60	522	662	1123	220	114	184	550	340	378	477	173	498
70	584	727	1187	252	126	206	573	391	399	546	192	556
80	606	773	1248	268	131	219	621	439	418	570	200	713
90	638	816	1305	285	134	226	659	469	446	606	208	783
100	645	858	1328	265	128	199	692	514	494	614	194	905

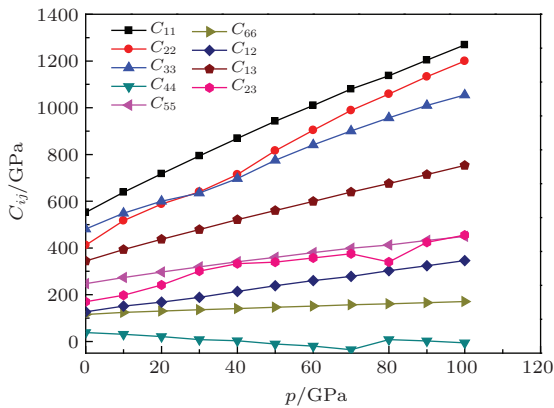


图4 P₁-IrB 弹性常数 C_{ij} 随压强 p 的关系

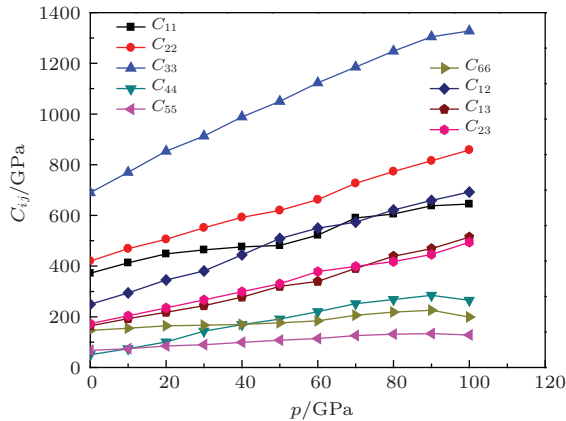


图5 P₅-IrB₂ 弹性常数 C_{ij} 随压强 p 的关系

从表2和图4可看出: P₁-IrB结构的弹性常数中, 除 C_{44} 外其余的 C_{ij} 均随压强增大而有不同幅度的增大. 各弹性模量中, 体弹模量 B 和剪切模量 G 均随压强增大而增大, 表明结构的硬度也逐渐增大. 从表3和图5则可以发现: P₅-IrB₂ 各弹性常数均随压强增大而增大, 根据正交晶系晶体稳定性条

件, 此结构是弹性稳定的, 同时比较各压强下的各弹性常数值发现抗压缩能力较强, 弹性模量中的 B 和 G 也呈递增趋势, 亦表明结构的硬度在增大, 但对于杨氏模量和在 b 方向的晶格常数, 在 50 GPa 时发生突变. 由文献 [25] 中图 3-2 对 P₅-IrB₂ 结构计算的形成焓随压强的变化可看出在 0—100 GPa 并没有发生相变, 因此也可以推断正是由于晶体结构的改变使得随着压强的增大杨氏模量和在 b 方向的晶格常数在 50 GPa 时发生了异常变化.

4 电子结构

为了进一步了解 P₁-IrB 和 P₅-IrB₂ 的性质, 本文还计算了两种结构在零压下的能带结构和总态密度以及分波态密度, 图6和图8分别为 P₁-IrB 的能带结构和总态密度以及分波态密度; 图7和图9为 P₅-IrB₂ 的能带结构和总态密度以及分波态密度. 从图中可以看出: P₁-IrB 和 P₅-IrB₂ 结构在费米能级处均不为零, 且没有明显的带隙, 说明两种结构都有金属性. 电子结构的更多特征可以通过体系的总态密度以及分波态密度来描述, 从图8可以看出, 在价带底, 能量在 -13—6.5 eV 之间, 能态密度主要由 Ir 的 d 轨道和 B 的 p 轨道耦合而得到, 表明此时两个轨道上的原子间有较强的共价作用, 6.5—10 eV 主要由 B 的 p 轨道贡献. 从图9可以看出, 在价带底能量在 -15—7 eV 之间, 能态密度主要由 Ir 的 d 轨道和 B 的 p 轨道耦合而得, 同样可知两轨道上原子有较强的共价作用, 而在价带顶以及导带, 能量在 -7—13 eV 之间, B 的 p 轨道上的电子起主要作用. 从 P₁-IrB 和 P₅-IrB₂ 两种结构的能带结构和态密度图可知二者均有金属性.

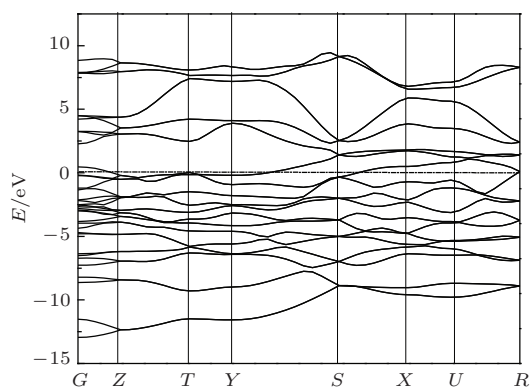


图6 P₁-IrB的能带结构

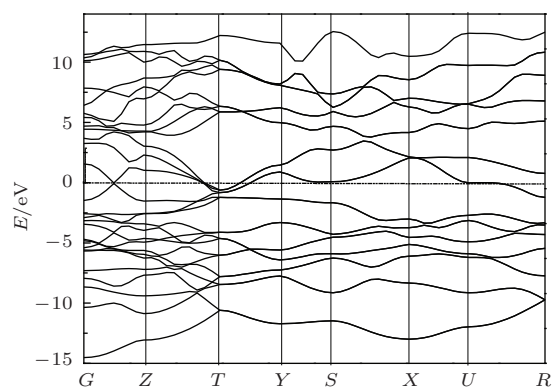


图7 P₅-IrB₂的能带结构

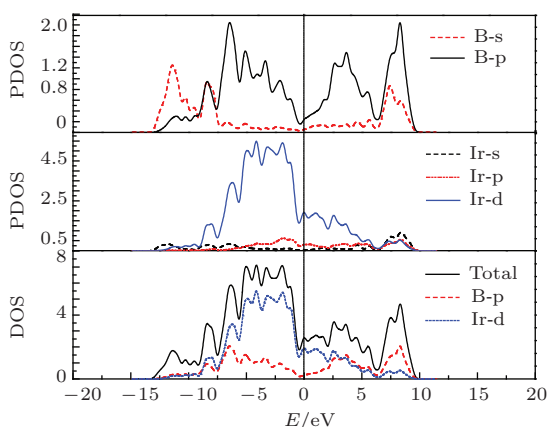


图8 (网刊彩色) P₁-IrB结构的总态密度和分波态密度图

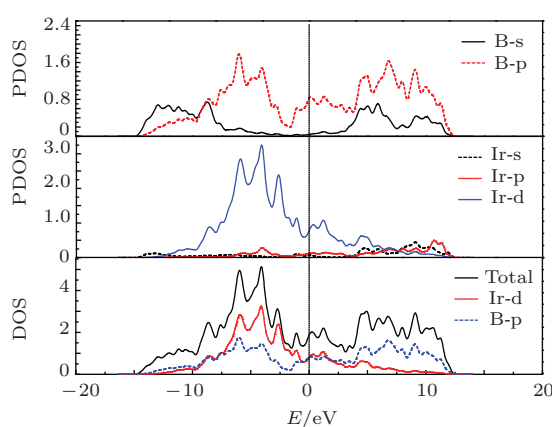


图9 (网刊彩色) P₅-IrB₂结构的总态密度和分波态密度图

5 结 论

本文用第一性原理分别计算了0—100 GPa静水压下P₁-IrB和P₅-IrB₂结构的平衡态晶格常数、弹性常数等性质。计算结果表明：对于P₁-IrB结构，随着压强的增大，其不可压缩性逐渐增强，各弹性常数除C₄₄外，均呈现增大的变化趋势，但在各个方向上的变化快慢有所不同，表明在各方向上受压强影响程度不同，而C₄₄呈现递减趋势，表明在这一方向上受压强影响较大而抗压性较弱。同样体弹模量和剪切模量也随着压强的增大而增大，说明随着压强的增大，硬度也逐渐增大。对于P₅-IrB₂结构，随着压强的增大，不可压缩性逐渐增强，各弹性常数也呈现不同程度的增大趋势，但压强增加到50 GPa时，杨氏模量和在b方向上晶格常数发生异常变化，经分析其晶体稳定性条件不再满足，说明高压下该晶体结构发生了改变。从P₁-IrB和P₅-IrB₂的能带结构和态密度图可以发现这两种结构均有金属性。通过对P₁-IrB和P₅-IrB₂平衡态结构

以及微观特性的探讨，可以预测P₁-IrB和P₅-IrB₂为潜在的抗压缩材料，并有可能成为新型金属材料的过渡金属硼化物，从而为实验探索合成新型硬度材料提供一定的理论指导，并对实验上制备这类材料提供指导意义。

参考文献

- [1] Teter D M 1998 *MRS Bull.* **23** 22
- [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] Cohen M L 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7988
- [4] Solozhenko V L, Dubrovinskaia N A, Dubrovinsky L S 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1508
- [5] Song H, Zhang Y, Chen C F 2005 *Physics* **34** 414 (in Chinese) [孙弘, 张翼, 陈长风 2005 物理 **34** 414]
- [6] Jiang Y L, Zhang B, Pan H 2006 *Jiangsu Build. Mater.* **1** 35 (in Chinese) [姜亚林, 张斌, 潘虎 2006 江苏建材 **1** 35]
- [7] Tian Y J, Xu B, Zhao Z S 2012 *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **3** 93

- [8] Li Q, Wang H, Ma Y M 2009 *J. Superhard Mater.* **32** 192
- [9] Sproul W D 1996 *Science* **273** 889
- [10] Zhao Y, He D W, Daemen L L, Shen T D, Schwarz R B, Zhu Y, Bish D L, Huang J, Zhang J, Shen G, Qian J, Zerda T W 2002 *J. Mater. Res.* **17** 3139
- [11] Solozhenko V L, Kurakevych O O, Andrault D, Godec Y L, Mezouar M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 015506
- [12] Solozhenko V L, Andrault D, Fiquet G, Mezouar M, David C R 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 1385
- [13] Li Q, Wang M, Artem R O, Cui T, Ma Y M 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 053514
- [14] Li Q, Wang H, Tian Y J, Xia Y, Cui T 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 023507
- [15] Li D H, Su W J, Zhu X L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 023103 (in Chinese) [李德华, 苏文晋, 朱晓玲 2012 物理学报 **61** 023103]
- [16] Zhu X L, Li D H, Cheng X L 2008 *Solid State Commun.* **147** 301
- [17] Yao Y S, John S T, Dennis D, Klug 2009 *Phys. Rev. B* **80** 094106
- [18] Zhao L K, Zhao E J, Wu Z J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 046201 (in Chinese) [赵立凯, 赵二俊, 武志坚 2013 物理学报 **62** 046201]
- [19] Zhang X H, Gregory E H, William G, Fahrenholtz 2008 *Mater. Lett.* **62** 4251
- [20] Gu Q, Krauss G, Steurer W 2008 *Adv. Mater.* **20** 3620
- [21] Rau J V, Latini A 2009 *Chem. Mater.* **21** 1407
- [22] Alessandro L, Julietta V Rau, Roberto T, Amanda G, Valerio R A 2010 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2** 581
- [23] Zhao W J, Wang Y X J 2009 *Solid State Chem.* **182** 2880
- [24] Wang Y, Chen W, Chen X, Liu X H, Ding Z H 2012 *Alloys and Compounds* **538** 115
- [25] Wang D Y, Wang B, Wang Y X 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 21961
- [26] Wang Y C, Lv J, Zhu L, Ma Y M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 094116
- [27] Gui L J, Liu Y L, Wang W T, Zhang Y, Lv G H, Yao J E 2013 *Chin. Phys. B* **22** 106109
- [28] Yang C Y, Zhang R 2014 *Chin. Phys. B* **23** 026301
- [29] Zhang L, Ji G F, Zhao F, Gong Z Z 2011 *Chin. Phys. B* **20** 047102
- [30] Biermann S, Aryasetiawan F, Georges A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 086402
- [31] Xu G L, Zhu Z H 2008 *J. Sichuan Normal University (Natural Science)* **31** 325 (in Chinese) [徐国亮, 朱正和 2008 四川师范大学学报 **31** 325]
- [32] Tian M F, Deng X Y, Fang Z, Dai X 2011 *Phys. Rev. B* **84** 205124
- [33] 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
- [34] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [35] Ceperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. B* **45** 566
- [36] Perdew J P, Burke K, Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [37] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [38] Monkhorst H J, Pack J D 1977 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [39] Pack J D, Monkhorst H J 1977 *Phys. Rev. B* **16** 1748
- [40] Peng F, Chen D, Yang X D 2009 *Solid State Commun.* **149** 2135
- [41] Wang D Y 2013 *M. S. Thesis* (Kaifeng: Henan University) (in Chinese) [王德玉 2013 硕士学位论文 (开封: 河南大学)]

First-principles calculations of the mechanical properties of IrB and IrB₂*

Zeng Xiao-Bo¹⁾ Zhu Xiao-Ling²⁾ Li De-Hua^{1)†} Chen Zhong-Jun³⁾ Ai Ying-Wei⁴⁾

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

2) (College of Electronic Information Engineering, Chengdu University, Chengdu 610106, China)

3) (School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

4) (College of Life Science, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

(Received 25 February 2014; revised manuscript received 18 April 2014)

Abstract

We have employed ab-initio plane-wave pseudopotential density functional theory to calculate the equilibrium lattice parameters, elastic constants, under the hydrostatic pressures from 0 to 100 GPa for P₁-IrB with *Pnma* space group and P₅-IrB₂ with *Pmmn* structures. Results show that the P₁-IrB structure is stable, and the incompressibility is enhanced with the increase of pressure. And the elastic constants, bulk modulus, shear modulus for P₅-IrB₂ structure exhibit the regular changes under the hydrostatic pressures from 0 to 100 GPa. But when the pressure becomes 50 GPa, the Young's modulus and the lattice constant in the direction *b* for P₅-IrB₂ structure will change exceptionally. Results show that both are not of obvious band gaps in P₁-IrB and P₅-IrB₂ electronic structures under zero pressure, because of the covalent effect between Ir and B atoms. The analysis of band structure and the figure of density of states for P₁-IrB and P₅-IrB₂ indicate that the two kinds of structure have metal properties.

Keywords: P₁-IrB, P₅-IrB₂, first-principles, mechanical properties

PACS: 31.15.es, 17.15.Mb

DOI: 10.7498/aps.63.153101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 41171175), and the Construction Plan for Scientific Research Innovation Teams of Universities in Sichuan Province (Grant No. 12TD008).

† Corresponding author. E-mail: huadel@163.com