

Datormodelēšanas pētījums par elastīgajām un elektroniskajām īpašībām A_2SiF_6 ($A = Na, K, Cs$) heksafluorosilikātiem hidrostatiskā spiediena ietekmē

Ilya Chervyakov¹, Leonid L. Rusevich¹, Mikhail G. Brik^{1,2}, Denis Gryaznov¹, Alok M. Srivastava³,
Guntars Zvejnieks¹, Dmitry Bocharov¹, Māra Putniņa¹, Eugene A. Kotomin¹
¹*Cietvielu fizikas institūts, Latvijas Universitāte, Kengaraga iela 8, LV-1063 Rīga, Latvija*
²*Fizikas institūts, Tartu Universitāte, W. Ostvalda iela 1, Tartu 50411, Igaunija*
³*Current Lighting Solutions LLC, 1099 Ivanhoe ceļš, Klīvlenda, OH 44110, ASV*

Heksafluorosilikāta sāļiem H_2SiF_6 ar vispārīgo formulu A_2SiF_6 ($A = Na, K, Cs$), dopēti ar Mn^{4+} joniem, piemīt augsts potenciāls izmantošanai kā sarkanajiem fosforiem, pateicoties to augstai termiskajai stabilitātei, labai gaismas emisijai un krāsu atdēvēs indeksam līdz 80%.

Šo savienojumu mehāniskās un elektroniskās īpašības augsta spiediena ietekmē līdz šim nav sistemātiski pētītas. Šajā darbā tika veikta hidrostatiskā spiediena modelēšana, izmantojot CRYSTAL23¹ programmatūru un LCAO (lineārā kombinācija atomu orbitālēm) metodi, lai izpētītu tīro A_2SiF_6 savienojumu elastīgās īpašības. Tika analizēti režģa parametri, starpatomu attālumu, aizliegtās zonas platuma un elastības konstantes uzvedība spiediena diapazonā no 0 līdz 20 GPa. Rezultāti parāda struktūru stingrības monotona pieaugumu, kā arī aizliegtās zonas paplašināšanos visiem savienojumiem. Visos gadījumos tika konstatēts, ka oktaedri $[SiF_6]$ gandrīz nedeformējas, palielinoties spiedienam. Tāpēc galvenās tilpuma izmaiņas rodas A-F attāluma samazināšanās dēļ.

Computational study of elastic and electronic properties of A_2SiF_6 ($A = Na, K, Cs$) hexafluorosilicates under hydrostatic pressure

Ilya Chervyakov¹, Leonid L. Rusevich¹, Mikhail G. Brik^{1,2}, Denis Gryaznov¹, Alok M. Srivastava³,
Guntars Zvejnieks¹, Dmitry Bocharov¹, Mara Putnina¹, Eugene A. Kotomin¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia, 8 Kengaraga Str., LV-1063 Riga, Latvia*
²*Institute of Physics, University of Tartu, W. Ostwald Str. 1, Tartu 50411, Estonia*
³*Current Lighting Solutions LLC, 1099 Ivanhoe Road, Cleveland, OH 44110, USA*

Hexafluorosilicate salts H_2SiF_6 of the type A_2SiF_6 ($A = Na, K, Cs$), doped with Mn^{4+} ions, have high potential for use as red phosphors due to their enhanced thermal stability, light emission, and color rendering index of up to 80%.

The mechanical properties of this class of compounds remain poorly studied. In this work, hydrostatic pressure modeling was performed using the CRYSTAL23¹ software package and the LCAO (linear combination of atomic orbitals) method to investigate the elastic properties of pure A_2SiF_6 matrices. The dependencies of lattice parameters, interatomic distances, band gap width, and elastic constants on pressure in the range of 0–20 GPa were presented and analyzed.

The results show a monotonic increase in the rigidity of the structures, as well as an expansion of the band gap for all compounds. In all cases, the octahedra $[SiF_6]$ were found to be a sufficiently rigid structure, as they almost did not deform with increasing pressure. Therefore, the main volume change occurs due to the reduction in the A-F distance.

1. Dovesi, R., et al. "CRYSTAL23 User's Manual." University of Torino: Torino, Italy (2023).
2. Rusevich L.L., Brik M.G., Gryaznov D., Srivastava A.M., Chervyakov I., Zvejnieks G., Bocharov D., Kotomin E.A., *Materials*, 2024, 17, 4865. <https://doi.org/10.3390/ma17194865>

This study was supported by the LZP-2023/1-0063 grant.