

高压下 Ir_2P 晶体结构预测与物理性质

李鑫, 马雪姣, 高文泉, 刘艳辉

(延边大学理学院物理系, 吉林 延吉 133000)

摘要: 在压强为 0~100 GPa 范围内, 运用 CALYPSO 结构搜索技术, 结合基于密度泛函理论中的第一性原理方法, 对 Ir_2P 晶体进行结构预测, 并对预测出的晶体结构和物理性质进行细致的研究。在常压下, 预测得出 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相具有立方结构, 其空间群为 $Fm\bar{3}m$, 与实验所得结构一致; 压强为 86.4 GPa 时, 发生结构相变, 由 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相转变为 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相, 为四方结构, 其空间群为 $I4/mmm$ 。在相变过程中, 晶体体积发生坍塌, 并且出现不连续变化的一级相变。电子性质计算表明, 86.4 GPa 时, 预测的 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相中导带和价带在费米面附近发生交叠, 表明其结构具有金属性质; 电子局域函数计算表明, $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相具有丰富的化学键, 包括极性共价键、金属键和离子键; Bader 电荷转移计算得出, 由于 Ir 原子具有较强的电负性, $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相中每个 P 原子向每个 Ir 原子电荷转移 $0.19e$ 。

关键词: 高压; 第一性原理; 晶体结构预测; Ir_2P

中图分类号: O521.2

文献标识码: A

过渡金属磷化物作为一种重要的功能材料, 在催化、电子、磁性和离子电池等方面都有重要的应用^[1-6]。然而, 与具有较高体弹模量和较大硬度的过渡金属硼化物、碳化物和氮化物相比^[7-8], 过渡金属磷化物研究相对较少。主要原因是在过渡金属磷化物的合成过程中, 大多以可燃元素磷为磷源进行高温或高压反应, 加大了实验的危险性, 从而阻碍其发展和应用^[9]。过渡金属磷化物的键合方式类似于硼化物的键合方式, 具有金属-类金属(M-P)的极性共价键和类金属-类金属(P-P)共价键, 这些化学键通常比在碳化物和氮化物中观察到的键能更强^[10]。

1998年, Oyama等^[11]首次报道了采取程序升温还原法制备磷化钼, 之后人们开始大量研究过渡金属磷化物的各种制备方法, 同时对其活性、稳定性、抗中毒等性能展开研究。近年来, 过渡金属磷化物(如 NiP 、 WP 、 Fe_2P 、 Co_2P 等)作为一种潜在的加氢处理催化剂^[12]受到了广泛关注。1940年 Zumbusch^[13]首次报道了一种过渡金属磷化物 Ir_2P , 并将 Ir_2P 的结构命名为反萤石结构。Rundqvist^[14]建立了铂金属磷化物体系, 用单晶衍射法进一步研究了 Ir_2P 的晶体结构。Raub等^[15]在铂金属与第IV主族、第V主族和第VI主族元素的化合物中发现了几种新的超导体(如 IrGe 和 Ir_3Ge_7), 但未发现铂金属化合物中的 Ir_2X 和 IrX ($\text{X}=\text{P}$, As , Sb , Bi)具有超导性质。Wang等^[16]在高温高压下合成了立方型 Ir_2P 结构, 并对其体弹模量等性质进行了研究, 发现 Ir 和 P 原子之间的极性共价键导致了 Ir_2P 的不可压缩性。Sun等^[17]研究了高温高压下合成 Ir_2P 反萤石结构中的高压弹性性质, 用应力-应变法研究了 Ir_2P 的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} , 通过计算弹性稳定性发现, 它至少稳定在 100 GPa, 并预测了在 $[100]$ 、 $[110]$ 和 $[111]$ 3个不同方向的纵波和横波速度与压力的关系。Liu等^[18]采用 Debye 模型与第一性原理相结合的研究方法, 并考虑准谐波近似的声子效应, 讨论了在 0~100 GPa 压强范围和 0~3 000 K 的温度范围内 Ir_2P 的热力学性质。

* 收稿日期: 2018-10-06; 修回日期: 2018-11-01

基金项目: 国家自然科学基金(11764043, 11474125, 51202084, 11504007, 11404035); 吉林省科技厅自然科学基金面上项目(20180101226JC)

作者简介: 李鑫(1993—), 女, 硕士, 主要从事材料的第一性原理计算研究. E-mail: 751686624@qq.com

通信作者: 刘艳辉(1971—), 女, 博士, 主要从事材料设计与物性研究. E-mail: yhliu@ybu.edu.cn

目前有关高压下 Ir_2P 晶体结构预测与物理性质的研究鲜有报道,因此探索高压下 Ir_2P 的相变和物理性质具有非常重要的意义。本研究运用 CALYPSO 结构搜索技术,结合基于密度泛函理论中的第一性原理方法,在高压下对 Ir_2P 晶体进行结构预测,以获得高压下的相变序列,并对预测的晶体结构和物理性质进行细致的研究。

1 计算细节

运用基于粒子群优化算法的 CALYPSO 软件^[19],在 0~100 GPa 的压强范围内对 Ir_2P 晶体进行结构预测。模拟晶胞使用 2 倍胞和 4 倍胞。结构优化采用基于密度泛函理论的 VASP 软件包^[20],电子间的交换关联势能函数采用广义梯度近似 (Generalized Gradient Approximation, GGA) 下的 Perdew-Burke-Ernzerh (PBE) 交换关联泛函^[21],赝势采用全电子投影缀加平面波^[21],Ir 原子的价电子为 $5d^86s^1$,P 原子的价电子为 $3s^23p^3$ 。为了保证能量收敛精度小于 1 meV/atom,能量收敛测试后,测得平面波的截断能为 850 eV。在第一布里渊区的积分采用 Monkhorst-Pack 网格方法,网格间距为 0.3 nm^{-1} 。晶体结构优化过程中,在保证不改变空间群的情况下,优化晶胞参数和原子位置,选取 10^{-5} eV 作为自洽能量收敛最小值,而优化应力收敛设置为 $0.001 \text{ eV/\AA}$ 。采用直接超晶胞的方法,应用 PHONOPY 软件,计算声子色散关系。

2 结构与讨论

2.1 晶体结构预测

对预测的 Ir_2P 晶体结构进行晶格常数和原子位置的优化,计算时所考虑的温度为 0 K,根据 $G = H - TS$ (其中 G 为吉布斯自由能, H 为焓, T 为温度, S 为熵),可以用焓代替自由能。通过计算预测结构的焓值随压强的变化,得出晶体结构的热力学稳定区间。绘制出焓差值随压强变化的曲线,如图 1 所示。从图 1(a) 中可以看出:在常压下,空间群为 $Fm\bar{3}m$ 的晶体结构焓值最低,记为 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相;当压强为 86.4 GPa 时, $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相发生相变,空间群为 $I4/mmm$ 的晶体结构的焓值较低,直到 100 GPa 时,该晶体结构依然稳定存在,将该结构记为 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相。图 1(b) 中给出了 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相和 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相体积随压强的变化曲线。通过分析发现,相变前, $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的体积随压强的增大而减小,体积随压强呈线性关系,当压强达到 86.4 GPa 时,体积发生塌缩,塌缩率为 5.56%,这种结构相变属于一级相变。

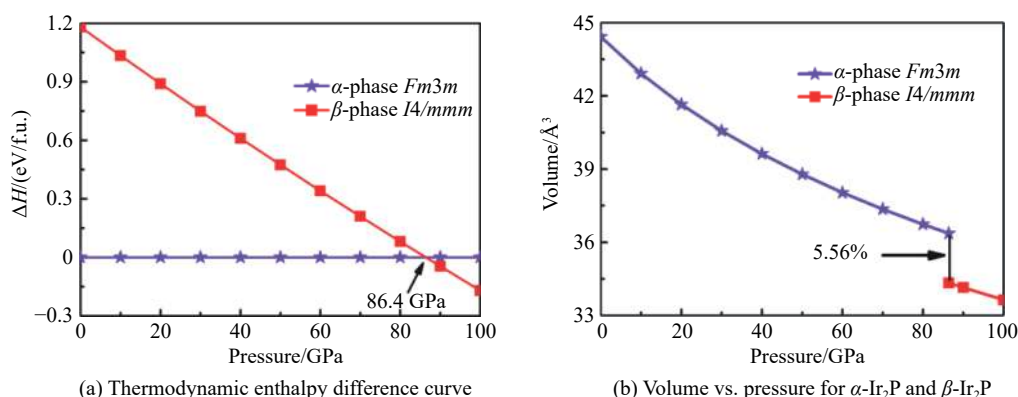


图 1 Ir_2P 的焓差曲线以及 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相和 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相体积随压强变化曲线

Fig. 1 Calculated enthalpies per formula unit (f.u.) of pressure with respect to $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ and the calculated pressure versus volume phase diagram of $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ and $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$

$\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相和 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的晶体结构见图 2, 优化后的平衡态晶格常数和原子位置如表 1 所示。图 2(a) 为 0 GPa 时预测的 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相结构。 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相具有立方对称性, 每个 Ir 原子被 4 个 P 原子包围, 构成正四面体结构, Ir-P 键的键长为 2.434 $\text{\AA}$, Ir-Ir 键的键长为 2.811 $\text{\AA}$ 。 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相结构的晶格常数为 $a=b=c=5.622 \text{ \AA}$,

表 1 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相和 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的平衡态晶格常数和原子位置Table 1 Lattice parameters and atomic coordinate of $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ and $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$

Phase	Pressure/GPa	Space group	Lattice parameters	Wyckoff position	
				Atoms	Site
$\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$	0	$Fm\bar{3}m$	$a=5.622 \text{ \AA} (5.535 \text{ \AA}^*), b=c=5.622 \text{ \AA}$ $\alpha=\beta=\gamma=90.0^\circ$	Ir1	8c(0.250, 0.250, 0.250)
				P1	4a(0, 0, 0)
$\beta\text{-Ir}_2\text{P}$	86.4	$I4/mmm$	$a=b=2.694 \text{ \AA}, c=9.461 \text{ \AA}$ $\alpha=\beta=\gamma=90.0^\circ$	Ir1	4e(0.500, 0.500, 0.146)
				P1	2a(0.500, 0.500, 0.500)

Note: The asterisk represents the experimental data from Ref. [13].

$\alpha=\beta=\gamma=90.0^\circ$, 其中 Ir 原子的 Wyckoff 占位为 $8c(0.25, 0.25, 0.25)$, P 原子的 Wyckoff 占位为 $4a(0, 0, 0)$, 此晶体结构数据与之前实验所得结果基本一致^[13], 进一步证明了本研究所采用的晶体结构预测方法以及计算参数的选择是准确可靠的。图 2(b) 所示为 86.4 GPa 压强下预测的 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相晶体结构。 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相具有四方对称性, 2 个 Ir 原子共用 4 个 P 原子, 组成正八面体, Ir-P 键的键长为 $2.355 \text{ \AA}$, Ir-Ir 键的键长为 $2.735 \text{ \AA}$ 。预测所得晶格参数为 $a=b=2.694 \text{ \AA}, c=9.461 \text{ \AA}, \alpha=\beta=\gamma=90.0^\circ$, 其中 Ir 原子的 Wyckoff 占位为 $4e(0.5, 0.5, 0.146)$, P 原子的 Wyckoff 占位为 $2a(0.5, 0.5, 0.5)$ 。

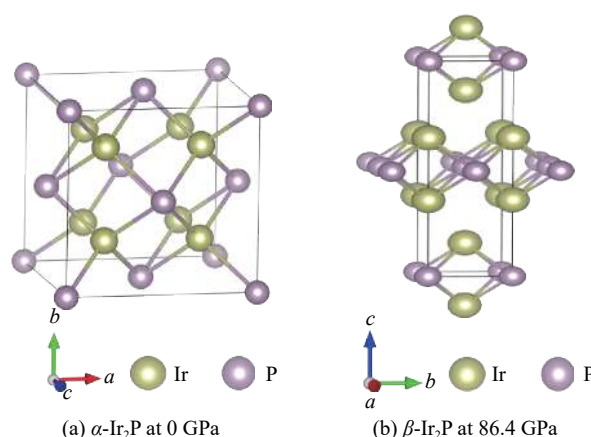
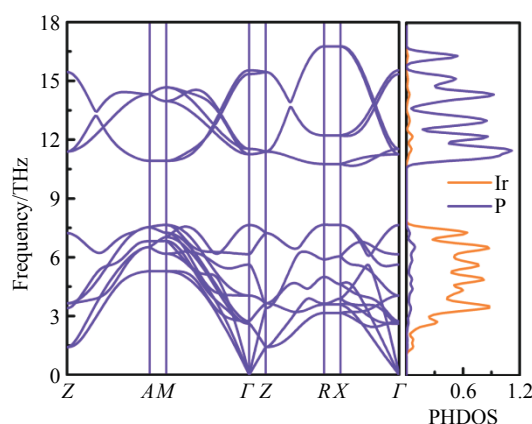
2.2 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相晶体结构的相稳定性

材料应用时, 需要对其稳定性有准确的认识。描述化合物的稳定性最常用的方法是判断其热力学和动力学是否稳定。若形成焓小于零, 说明该晶体结构热力学稳定。采用(1)式, 计算了在 86.4 GPa 压强下 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的形成焓。

$$\Delta H_m(\text{Ir}_2\text{P}) = [H_{\text{tot}}(\text{Ir}_2\text{P}) - 2H_{\text{bin}}(\text{Ir}) - H_{\text{bin}}(\text{P})]/3 \quad (1)$$

式中: $\Delta H_m(\text{Ir}_2\text{P})$ 表示 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的形成焓, $H_{\text{tot}}(\text{Ir}_2\text{P})$ 代表 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相结构相应稳定存在时的焓值, $H_{\text{bin}}(\text{Ir})$ 和 $H_{\text{bin}}(\text{P})$ 表示相应压强下 Ir 原子和 P 原子的焓值。计算得到 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 的形成焓为 -0.239 eV/atom , 说明在 86.4 GPa 下 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相具有热力学稳定性。

通过计算声子色散关系, 研究材料的动力学稳定性。晶格结构稳定的条件是所有简正声子频率均为有限的实值^[22]; 若为虚值, 则可以判定该材料出现了声子软化, 晶体结构不再稳定。本研究通过计算预测出 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相在 86.4 GPa 下的声子谱线和声子态密度 (Phonon Density of States, PHDOS), 如图 3 所示。分析声子谱发现: $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相在整个布里渊区中未出现声子软化现象, 说明 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相动力学稳定; 最大光学支频率为 16.7 THz 。通过声子态密度分析可得, 在 $10.7 \sim 16.7 \text{ THz}$ 的高频区域内主要由 P 原子贡献, 在 $1.1 \sim 7.7 \text{ THz}$ 的低频区域内主要由 Ir 原子贡献。

图 2 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相和 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的晶体结构Fig. 2 Crystal structures of $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ and $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 图 3 86.4 GPa 时 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相的声子谱和声子态密度Fig. 3 Phonon-dispersion curves and the PHDOS of $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ at 86.4 GPa

2.3 β -Ir₂P 相晶体结构的电子性质

为了了解高压 β -Ir₂P 相晶体结构的电子性质,研究了 β -Ir₂P 相晶体结构的电子能带结构和电子态密度(Density of State, DOS),如图 4 所示。在图 4(a)中,可以看到价带和导带跨越费米能级发生交叠,表明 β -Ir₂P 相晶体结构具有金属性。电子态密度计算结果(见图 4(b))表明,费米能级处的态密度主要由 Ir 原子的 d 轨道和 P 原子的 p 轨道贡献, Ir 原子的 s 、 p 轨道和 P 原子的 s 轨道的贡献相对较少,表明 Ir 原子的 d 轨道和 P 原子的 p 轨道之间存在杂化,在 Ir 和 P 原子之间形成了 Ir-P 共价键。

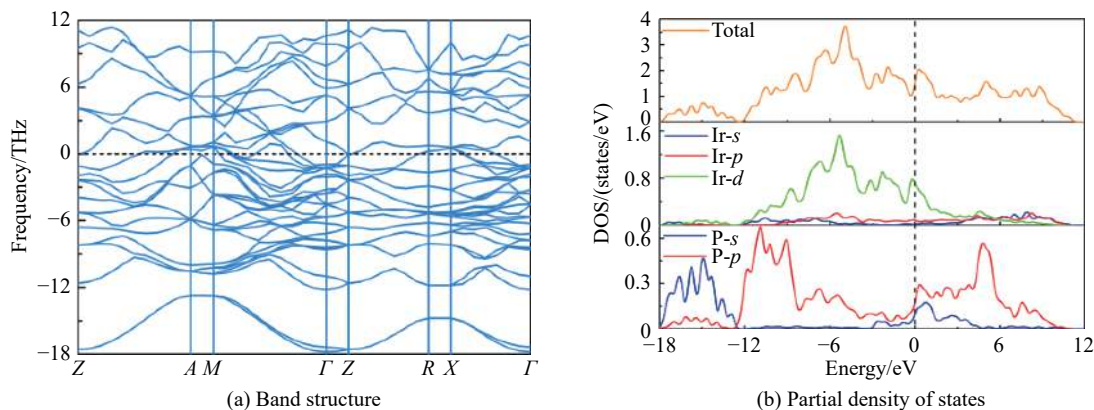


图 4 86.4 GPa 下 β -Ir₂P 相的能带结构和电子态密度

Fig. 4 Band structure and partial DOS of β -Ir₂P phase at 86.4 GPa

电子局域函数为揭示晶体结构化学键提供重要依据,为此计算了 β -Ir₂P 相的电子局域函数(Electron Localization Function, ELF),如图 5 所示。计算 ELF 时,等值面选取 0.7。从图 5(a)中可以看出,在 Ir 原子和 P 原子之间有明显的电子局域,并且电子局域主要偏向于 P 原子,证明在 Ir 原子和 P 原子之间形成共价键,并且为极性共价键。在图 5(a)中并未发现关于 P 原子与 P 原子之间的电子局域,说明高压 β -Ir₂P 相中没有 P-P 共价键,这一现象是由于在 β -Ir₂P 相中 P 与 P 原子之间的间距是 2.69 Å,而 P-P 成键的间距为 2.21 Å。图 5(b)为 β -Ir₂P 相 ELF 的二维切面图,晶格切面选取为 (010), ELF 数值范围是 0~1。ELF=1 表示电子完全局域化,ELF=0 表示电子完全离域化或该处没有电子^[23]。从图 5(b)中可以看出:在 Ir 原子与 P 原子之间存在电子局域,并且 P 原子附近对应的 ELF 值接近 1,为高度局域的电子分布,说明它们之间存在极性共价键;Ir 原子与 Ir 原子之间对应的 ELF 值接近 0.5,表明它们之间存在金属键;P 原子与 P 原子之间对应的 ELF 值接近零,表明电子在这些地方高度离域分布。

为了更加清晰地描述 Ir 原子与 P 原子之间的电子转移情况,计算了 Bader 电荷转移,计算数据列于表 2。由于 Ir 原子具有较强的电负性,在高压 β -Ir₂P 的晶体结构中 Ir 原子为受主, P 原子为施主,每个 P 原子向 Ir 原子转移电荷 0.19e。

表 2 86.4 GPa 下 β -Ir₂P 相的 Bader 电荷转移

Table 2 Calculated Bader charges of β -Ir₂P phase at 86.4 GPa

Space group	Pressure/GPa	Atom	Number	Charge value/e	Charge transfer/e
<i>I4/mmm</i>	86.4 GPa	Ir	2	9.19	-0.19
		P	1	4.62	0.38

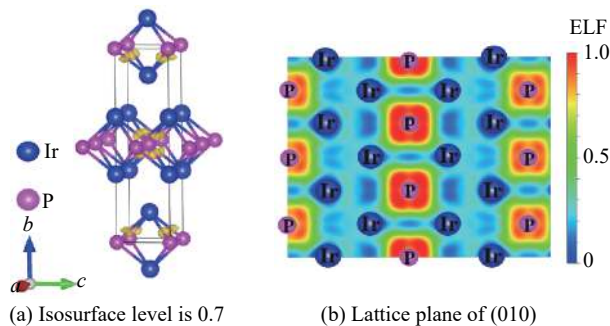


图 5 86.4 GPa 下 β -Ir₂P 相的电子局域函数

Fig. 5 Electron localization function of β -Ir₂P phase at 86.4 GPa

3 结 论

运用 CALYPSO 结构搜索技术, 结合基于密度泛函理论中的第一性原理赝势平面波方法, 在 0~100 GPa 压强范围内, 对过渡金属磷化物 Ir_2P 晶体进行了结构预测, 并对预测的晶体结构和物理性质进行了细致研究。常压下, 预测得出 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 具有立方结构, 空间群为 $Fm\bar{3}m$, 与实验所得结构一致; 当压强达到 86.4 GPa 时, Ir_2P 发生了结构相变, 由 $\alpha\text{-Ir}_2\text{P}$ 相变为 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$, 空间群转变为 $I4/mmm$ 。在相变过程中, 体积发生坍塌, 坍塌率为 5.56%。计算结果表明, 高压 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相晶体结构满足热力学和动力学稳定; 能带结构计算表明, 当压强为 86.4 GPa 时, $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相晶体结构在费米面附近的导带和价带发生交叠, 呈现出金属性; 电子局域函数表明, 高压 $\beta\text{-Ir}_2\text{P}$ 相具有极性共价键、金属键和离子键, 结构中未出现明显的 P 与 P 原子之间的共价键; Bader 电荷转移计算得出, 由于 Ir 原子具有较强的电负性, 每个 P 原子向每个 Ir 原子电荷转移为 $0.19e$ 。本研究结论可为进一步研究过渡金属磷化物提供参考。

参考文献:

- [1] HENKES A E, VASQUEZ Y, SCHAAK R E. Converting metals into phosphides: a general strategy for the synthesis of metal phosphide nanocrystals [J]. [Journal of the American Chemical Society](#), 2007, 129(7): 1896–1897.
- [2] MAUVERNAY B, DOUBLET M L, MONCONDUIT L. Redox mechanism in the binary transition metal phosphide Cu_3P [J]. [Journal of Physics and Chemistry of Solids](#), 2006, 67(5/6): 1252–1257.
- [3] BROCK S L, SENEVIRATHNE K. Recent developments in synthetic approaches to transition metal phosphide nanoparticles for magnetic and catalytic applications [J]. [Journal of Solid State Chemistry](#), 2008, 181(7): 1552–1559.
- [4] OYAMA S T, GOTT T, ZHAO H, et al. Transition metal phosphide hydroprocessing catalysts: a review [J]. [Catalysis Today](#), 2009, 143(1/2): 94–107.
- [5] HALL J W, MEMBRENO N, WU J, et al. Low-temperature synthesis of amorphous FeP_2 and its use as anodes for Li ion batteries [J]. [Journal of the American Chemical Society](#), 2012, 134(12): 5532–5535.
- [6] BILTZ W, WEIBKE F, MAY E, et al. Alloyability of platinum and phosphorus [J]. [Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie](#), 1935, 223(2): 129–143.
- [7] ZHANG X, QIN J, SUN X, et al. First-principles structural design of superhard material of ZrB_4 [J]. [Physical Chemistry Chemical Physics](#), 2013, 15(48): 20894–20899.
- [8] KANER R B, GILMAN J J, TOLBERT S H. Designing superhard materials [J]. [Science](#), 2005, 308(5726): 1268–1269.
- [9] SHI Y, ZHANG B. Correction: Recent advances in transition metal phosphide nanomaterials: synthesis and applications in hydrogen evolution reaction [J]. [Chemical Society Reviews](#), 2016, 45(6): 1781–1781.
- [10] CARENCO S, PORTEHAULT D, BOISSIERE C, et al. Nanoscaled metal borides and phosphides: recent developments and perspectives [J]. [Chemical Reviews](#), 2013, 113(10): 7981–8065.
- [11] LI W, DHANDAPANI B, OYAMA S T. Molybdenum phosphide: a novel catalyst for hydrodenitrogenation [J]. [Chemistry Letters](#), 1998, 27(3): 207–208.
- [12] OYAMA S T, GOTT T, ZHAO H, et al. Transition metal phosphide hydroprocessing catalysts: a review [J]. [Catalysis Today](#), 2009, 143(1/2): 94–107.
- [13] ZUMBUSCH M. Über die strukturen des uransubsulfids und der subphosphide des iridiums und rhodiums [J]. [Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie](#), 1940, 243(4): 322–329.
- [14] RUNDQVIST S. Phosphides of the platinum metals [J]. [Nature](#), 1960, 185(4705): 31.
- [15] RAUB C J, ZACHARIASEN W H, GEBALLE T H, et al. Superconductivity of some new Pt-metal compounds [J]. [Journal of Physics and Chemistry of Solids](#), 1963, 24(9): 1093–1100.
- [16] WANG P, WANG Y, WANG L, et al. Elastic, magnetic and electronic properties of iridium phosphide Ir_2P [J]. [Scientific Reports](#), 2016, 6(9): 21787.
- [17] SUN X W, BIOUD N, FU Z J, et al. High-pressure elastic properties of cubic Ir_2P from *ab initio* calculations [J]. [Physics Letters A](#), 2016, 380(43): 3672–3677.

- [18] LIU Z J, SONG T, SUN X W, et al. Thermal expansion, heat capacity and Grüneisen parameter of iridium phosphide Ir₂P from quasi-harmonic Debye model [J]. *Solid State Communications*, 2017, 253: 19–23.
- [19] WANG Y, LV J, ZHU L, et al. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization [J]. *Physical Review B*, 2010, 82(9): 094116.
- [20] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. *Physical Review B*, 1976, 13(12): 5188.
- [21] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865–3868.
- [22] BORN M, HUANG K. Dynamical theory of crystal lattices [J]. *American Journal of Physics*, 1954, 39(2): 113–127.
- [23] SAVIN A, NESPER R, WENGERT S, et al. ELF: the electron localization function [J]. *Angewandte Chemie International Edition in English*, 1997, 36(17): 1808–1832.

Evolution of Crystal Structures and Electronic Properties for Ir₂P under High Pressure

LI Xin, MA Xuejiao, GAO Wenquan, LIU Yanhui

(*Department of Physics, College of Science, Yanbian University, Yanji 133000, China*)

Abstract: The crystals of Ir₂P were predicted under the pressure ranging from 0 to 100 GPa using the CALYPSO structure exploration technique with the first-principles method based on the density functional theory. The predicted physical properties and crystal structures were examined in detail. At ambient pressure, the predicted α -Ir₂P phase was found to have a cubic structure with $Fm\bar{3}m$ space group, which is consistent with the experimental structure. The pressure-induced structural transformations were unraveled, from the α -Ir₂P phase to the β -Ir₂P phase at 86.4 GPa. The predicted β -Ir₂P phase has $I4/mmm$ space group. In the process of phase transition, the volume of the crystal collapses and a discontinuous first order phase transition occurred. The calculation of the electronic properties showed that the predicted conduction bands and the valence bands of the β -Ir₂P phase overlap near the Fermi surface at 86.4 GPa, indicating that the structure of the β -Ir₂P phase has metallic properties. The electron localization function revealed that the β -Ir₂P phase has a polar covalent bond, a metallic bond and an ionic bond. The Bader charge transfer calculations showed that each P atom transfers 0.19e to Ir atom, mainly due to the strong electronegativity of the Ir atoms.

Keywords: high pressure; first-principles; crystal structure prediction; Ir₂P